



UCSF
Universidad Católica
de Santa Fe

Farmacia



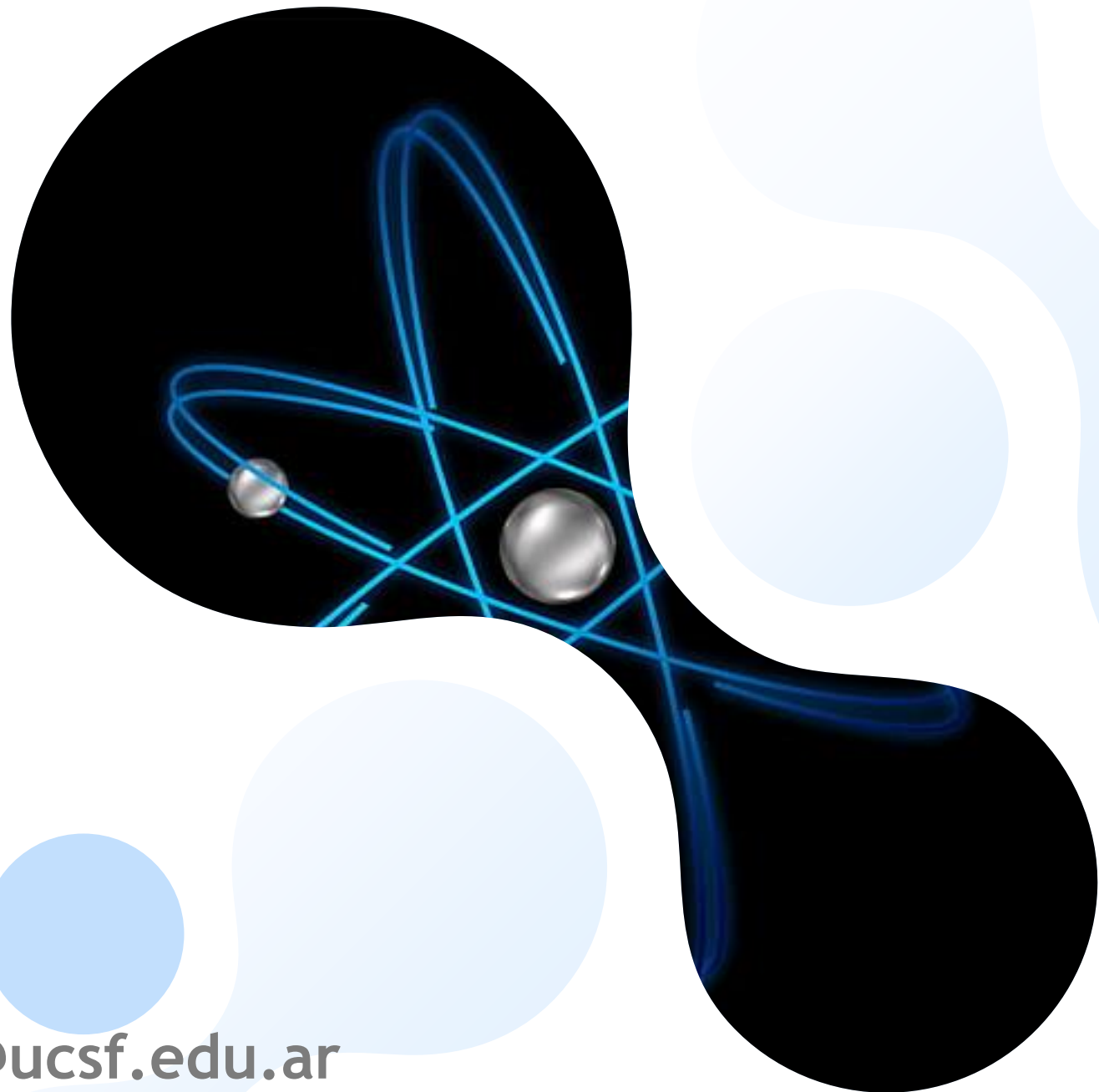
Facultad de Ciencias de la Salud

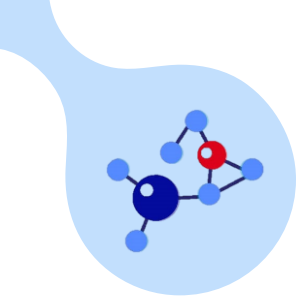
Química General

Cristhian Andrés
Fonseca B.



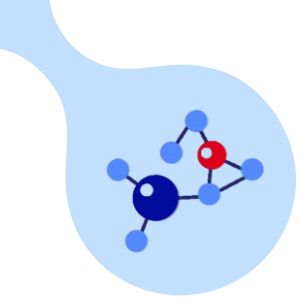
cristhian.fonsecabenitez@ucsf.edu.ar





Enlace Químico II



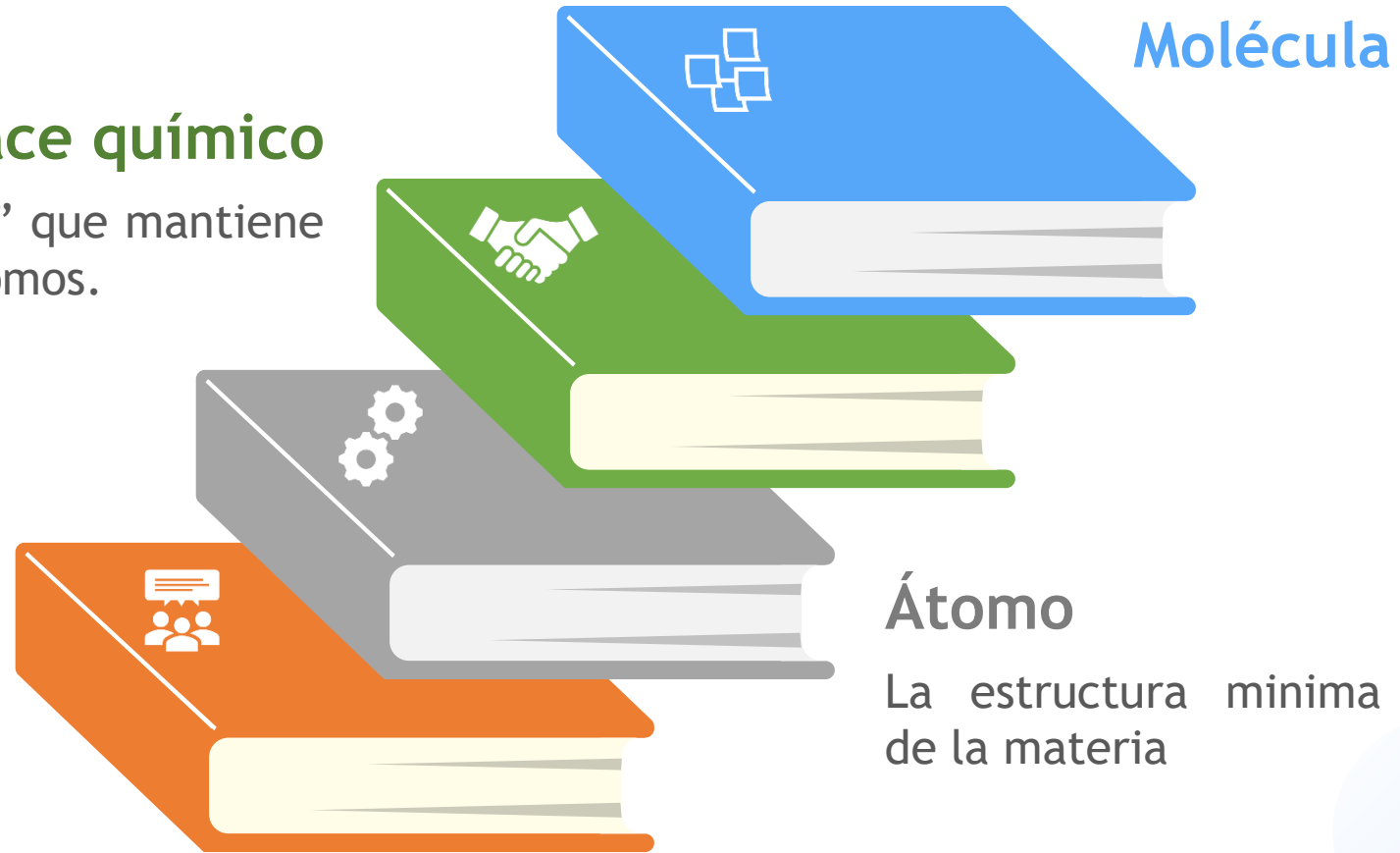


Enlace químico

El “pegamento” que mantiene unidos a los átomos.

Materia y Energía

Manifestación de la energía que ocupa un espacio y tiene masa.

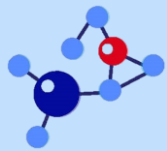


Molécula

Átomo

La estructura mínima de la materia





¿A qué llamamos Elemento?



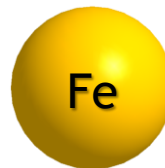
Li
Litio



Na
Sodio



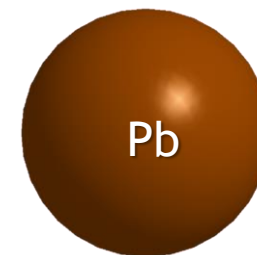
Mn
Manganeso



Fe
Hierro



Co
Cobalto



Pb
Plomo

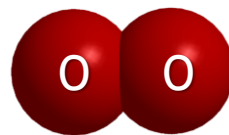
Elemento:

Sustancia pura conformada por **átomos de una misma especie**, que no puede ser dividida en sustancias más simples.

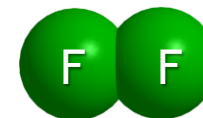
Pueden ser monoatómicos o poliatómicos.



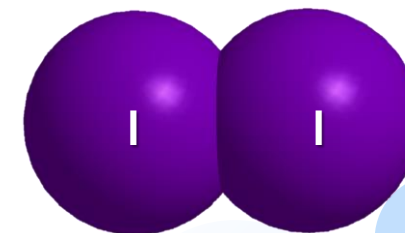
H₂
Hidrógeno



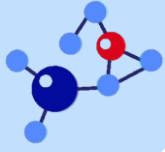
O₂
Oxígeno



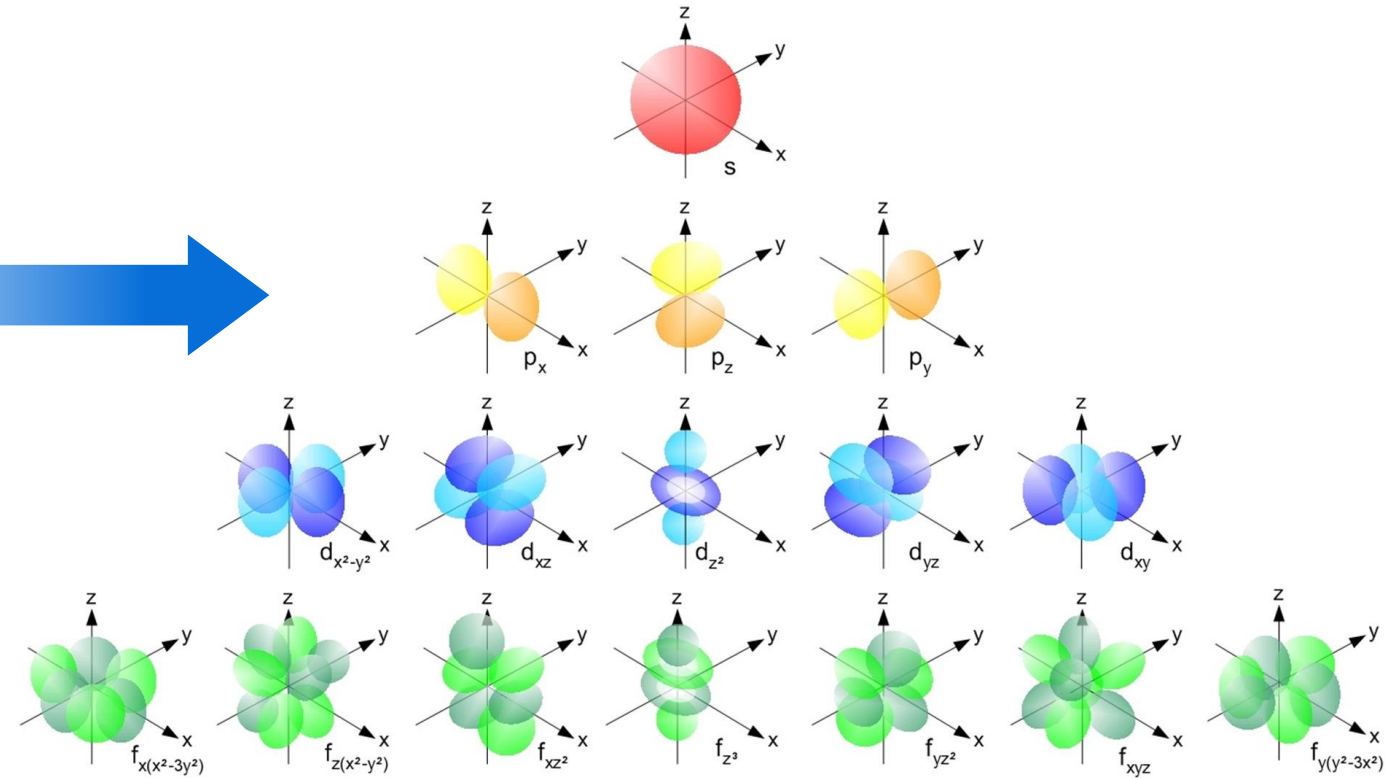
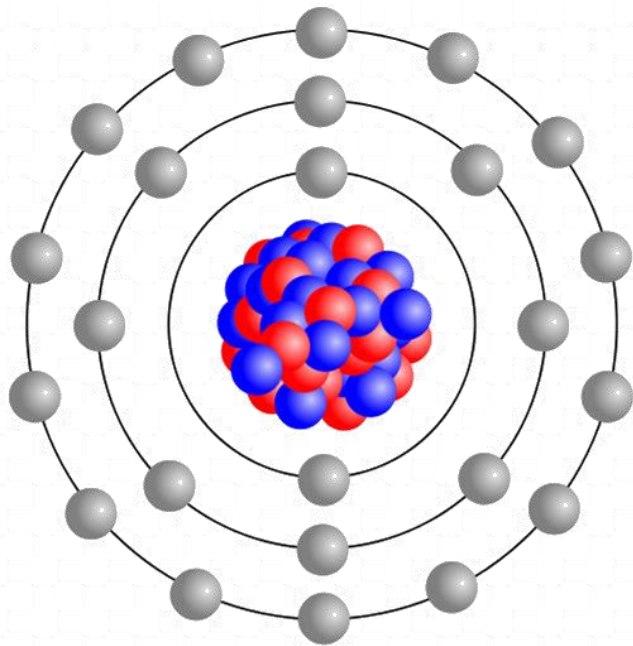
F₂
Flúor

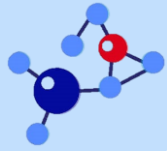


I₂
Yodo

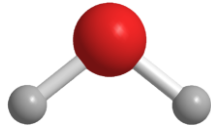


Para los átomos vimos cómo era posible expandir la estructura concéntrica a una estructura tridimensional que cumpla con determinados requisitos, resultado de numerosas investigaciones.

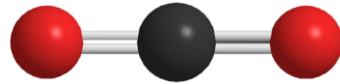




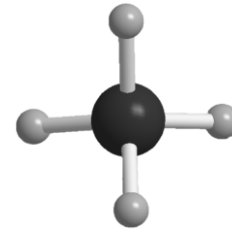
¿A qué llamamos Compuesto?



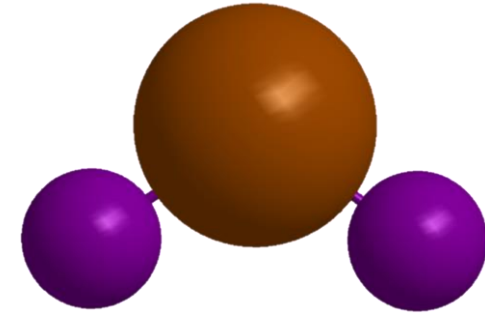
H_2O
Agua



CO_2
Dióxido de Carbono



CH_4
Metano



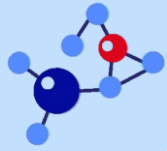
PbI_2
Yoduro de Plomo

Compuesto:

Sustancia pura conformada por **átomos de dos o más especies en proporciones definidas**, que puede ser dividida en sustancias más simples a través de métodos químicos.

Siempre son poliatómicos.

Los átomos unidos por enlaces covalentes y que forman moléculas exhiben una estructura y distribución espacial más compleja que obedece a ciertas leyes naturales y teorías científicas.



Geometría Molecular

Los electrones de la capa de valencia de un átomo son los que participan en la formación de enlaces.

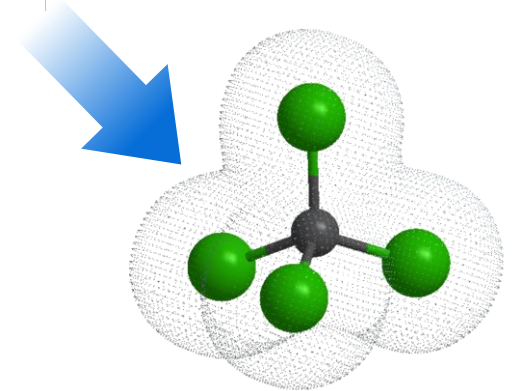
El modelo que ayuda a predecir la geometría de las moléculas covalentes se denomina **Modelo de repulsión de los pares de electrones en la capa de valencia (RPECV)**

El **enlace covalente** se puede explicar por medio de dos teorías:

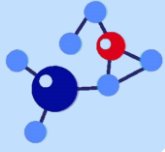
- ✓ Teoría del enlace de valencia (EV)
- ✓ Teoría del orbital molecular (OM)

La **geometría de una molécula** afecta sus **propiedades físicas y químicas**; por ejemplo, el punto de fusión, el punto de ebullición, la densidad y el tipo de reacciones en que pueden participar.

La capa de valencia es la órbita más externa del átomo



Modelo molecular

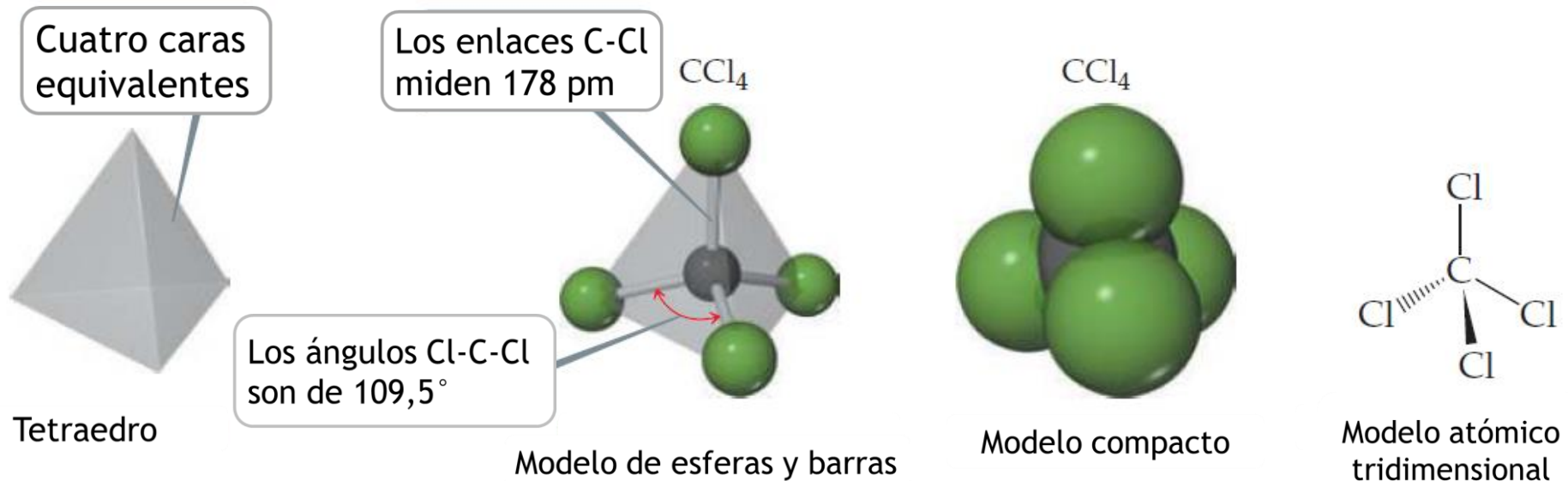


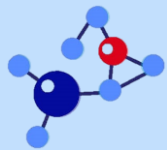
Modelos moleculares

La estructura de Lewis representa a todos los átomos en el mismo plano, sin embargo las moléculas son objetos tridimensionales y quedan mejor representados a través de **modelos moleculares**.

La forma de una molécula está determinada por sus **ángulos de enlace**, formados por las líneas que unen los núcleos de los átomos de la molécula. Los ángulos de enlace de una molécula, junto con las longitudes de enlace, definen la forma y el tamaño de la molécula.

Tetracloruro de carbono



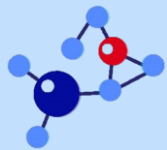


Modelos moleculares

Modelo de repulsión de los pares de electrones en la capa de valencia (RPECV)

El modelo RPECV se basa en la idea de que los dominios de electrones tienen carga negativa y, por lo tanto, se repelen entre sí. Explica la **distribución geométrica de los pares electrónicos** que rodean al átomo central en términos de la repulsión electrostática entre dichos pares. Dos reglas generales para la aplicación del modelo RPECV son:

1. Al considerar la repulsión de los pares electrónicos, los enlaces dobles y triples se pueden tratar como si fueran enlaces sencillos, pero la densidad electrónica ocupa mayor espacio.
2. Si una molécula tiene dos o más estructuras resonantes, podemos aplicar el modelo RPECV a cualquiera de ellas. Por lo general, las cargas formales no se muestran.



Modelos moleculares

Modelo de repulsión de los pares de electrones en la capa de valencia (RPECV)

Las ideas básicas de la teoría de la repulsión de los pares electrónicos de la capa de valencia (RPECV) son:

Cada región de alta densidad electrónica en la capa de valencia de un átomo central es importante. Esta región es conocida como *grupo de electrones*. Los grupos de electrones de la capa de valencia del *átomo central* se repelen entre sí y se ordenan alrededor del *átomo central* de manera que la repulsión entre ellos sea lo más pequeña posible. Esto da como resultado una máxima separación de los grupos de electrones alrededor del átomo central.

Un **átomo central** es todo átomo que esté enlazado a más de un átomo diferente. Primero se cuenta el número de **grupos de electrones** que rodea al *átomo central*, como sigue:

1. En RPECV, cada átomo enlazado se cuenta como *un solo grupo de electrones*, no importa si el enlace es sencillo, doble o triple.
2. En RPECV, un par no compartido de los electrones de valencia del átomo central se cuenta como *un solo grupo de electrones*.



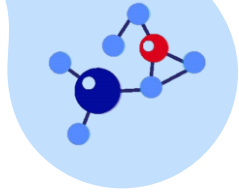
Modelos moleculares

Modelo de repulsión de los pares de electrones en la capa de valencia (RPECV)

Fórmula:	CO ₂	NH ₃	CH ₄	NO ₃ ⁻
Fórmula de Lewis :	$\text{:}\ddot{\text{O}}=\text{C}=\ddot{\text{O}}\text{:}$	$\begin{array}{c} \text{H} \\ \\ \text{:N}-\text{H} \\ \\ \text{H} \end{array}$	$\begin{array}{c} \text{H} \\ \\ \text{H}-\text{C}-\text{H} \\ \\ \text{H} \end{array}$	$\left[\begin{array}{c} \text{:}\ddot{\text{O}}\text{:} \\ \\ \text{N} \\ / \quad \backslash \\ \text{:}\ddot{\text{O}}\text{:} \quad \text{:}\ddot{\text{O}}\text{:} \end{array} \right]^{-}$
Átomo central:	C	N	C	N
Número de átomos enlazados al <i>átomo central</i> :	2	3	4	3
Número de pares no enlazados en el <i>átomo central</i> :	0	1	0	0
Número total de grupos de electrones en el <i>átomo central</i> :	2	4	4	3

Según la teoría RPECV, la molécula o ion es más **estable** cuando los grupos de electrones del átomo central están lo más **separados** posible.

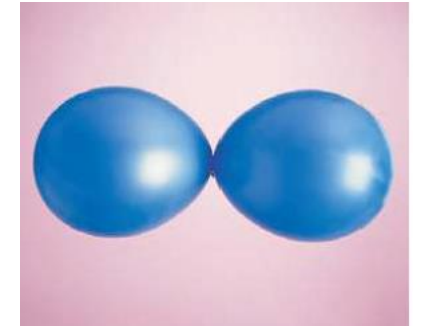
La distribución de estos *grupos de electrones* alrededor del átomo central se conoce con el nombre de **geometría electrónica** del átomo central.



Geometría molecular para átomos centrales que no tienen pares de electrones libres


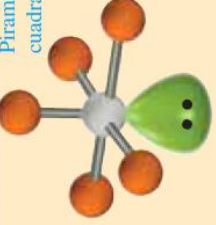
Se tiene que conocer primero la geometría electrónica antes de poder deducir la geometría molecular

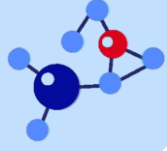
Grupos de electrones del átomo central	Geometría electrónica*			Modelos de barras y esferas
	Orientación de los grupos de electrones	Descripción; ángulos [†]	Dibujo lineal [‡]	
2		lineal; 180°		
3		trigonal plana; 120°		
4		tetraédrica; 109.5°		
5		bipiramidal trigonal; 90°, 120°, 180°		
6		octaédrica; 90°, 180°		

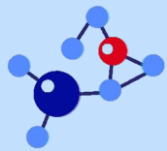


Geometría molecular para átomos centrales que tienen pares de electrones libres

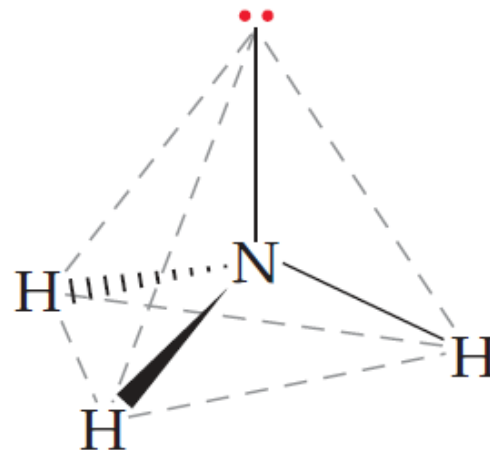
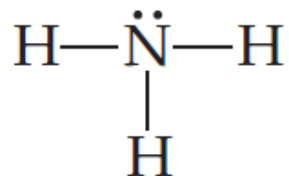
Se tiene que conocer primero la geometría electrónica antes de poder deducir la geometría molecular

Fórmula general	Grupos de electrones ^a	Geometría electrónica	Hibridación del átomo central	Pares no compartidos	Geometría molecular	Ejemplos
AB_2U	3	trigonal plana	sp^2	1	Angular 	O_3, NO_2^-, SO_2
AB_3U	4	tetraédrica	sp^3	1	Piramidal trigonal 	NH_3, SO_3^{2-}
AB_2U_2	4	tetraédrica	sp^3	2	Angular 	H_2O, NH_2^-
AB_4U	5	bipiramidal trigonal	sp^3d	1	Sube y baja 	SF_4
AB_3U_2	5	bipiramidal trigonal	sp^3d	2	Forma en T 	ICl_3, ClF_3
AB_2U_3	5	bipiramidal trigonal	sp^3d	3	Linear 	XeF_2, I_3^-
AB_5U	6	octaédrica	sp^3d^2	1	Piramidal cuadrada 	IF_5, BrF_5
AB_4U_2	6	octaédrica	sp^3d^2	2	Cuadrada plana 	XeF_4, IF_4^-





Modelos moleculares



Polígono:

poli: muchos

gonía: ángulo, lado

Poliedro:

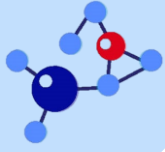
hedra: base, cara



1 Dibuje la estructura de Lewis

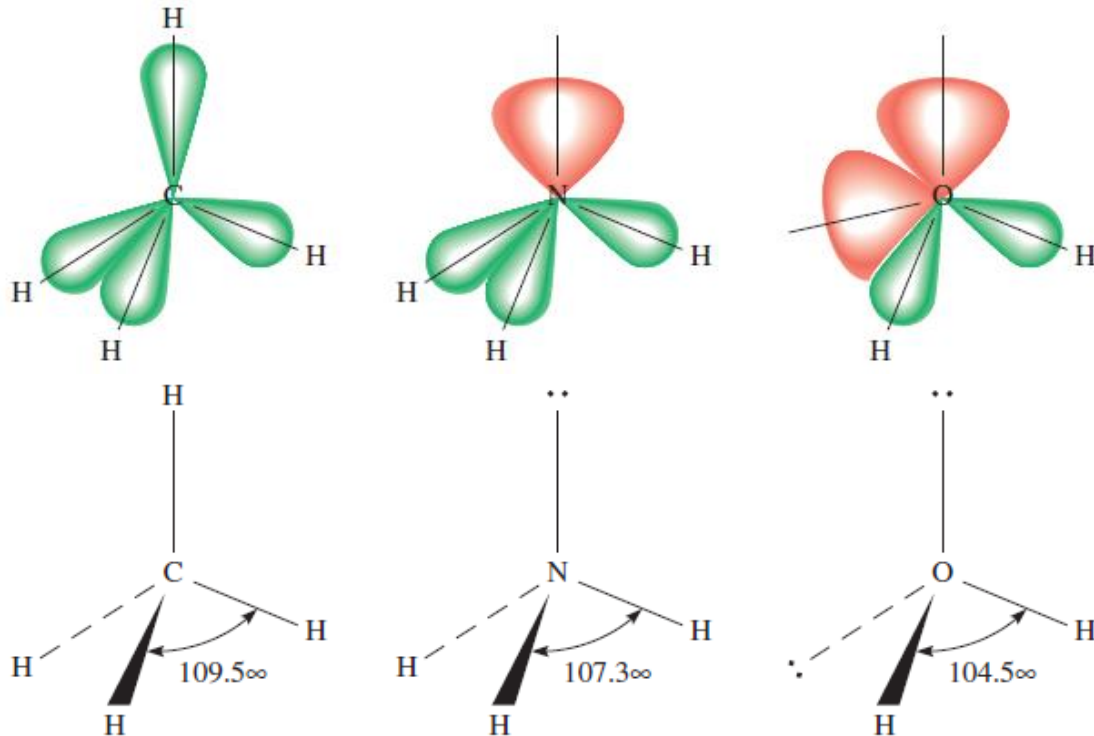
2 Determine la geometría, según la tabla, de los dominios contando **todos** los dominios de electrones

3 Determine la geometría molecular contando **solo** los dominios de enlace de electrones para ver los arreglos de los átomos enlazados (piramidal trigonal)

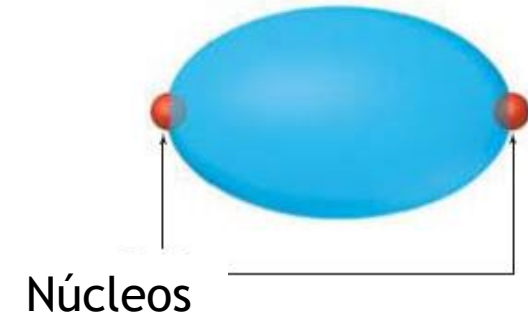


Modelos moleculares

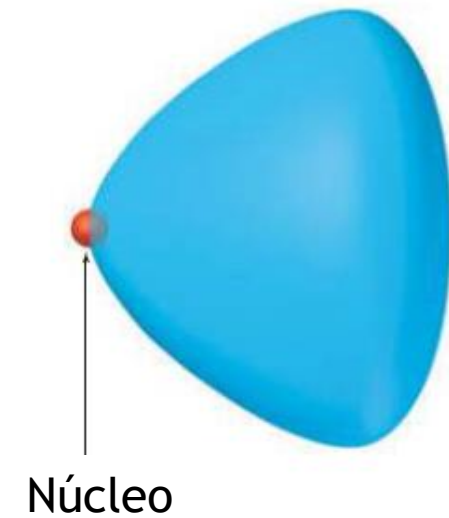
Los pares de electrones no enlazantes influyen en los ángulos de enlace de las moléculas. Por ejemplo, se puede observar que los ángulos de enlace disminuyen a medida que aumentan los pares de electrones no enlazantes en tres moléculas con geometría de base tetraédrica.

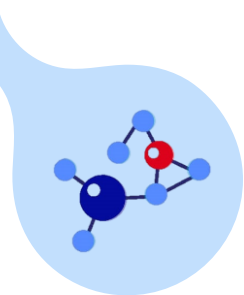


Par de electrones enlazante



Par de electrones no enlazante





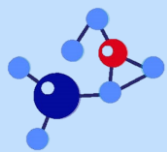
Modelos moleculares

Modelo de repulsión de los pares de electrones en la capa de valencia (RPECV)

En resumen, el modelo RPECV plantea las siguientes conclusiones:

1. Las moléculas y iones poliatómicos tienen forma definida.
2. Las propiedades de las moléculas y iones poliatómicos dependen, en gran medida, de su forma. Son muy importantes las capas de electrones incompletas y pares de electrones no compartidos sobre el elemento central.
3. Sólo existen *cinco* geometrías electrónicas y todas las geometrías moleculares son simplemente casos especiales de estas cinco geometrías básicas.

El modelo RPECV permite definir la **distribución en el espacio** de los enlaces químicos y/o los pares de electrones bajo una **geometría determinada**

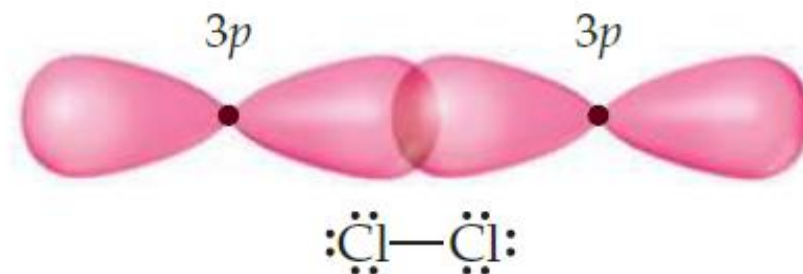
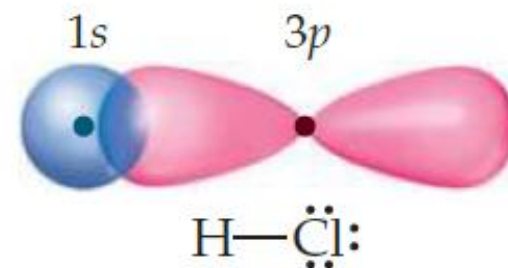
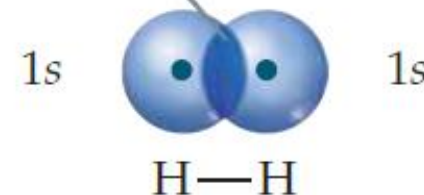


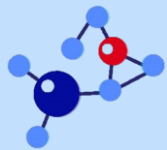
Hibridación

Aunque el concepto de solapamiento de orbitales nos ayuda a entender la formación de enlaces covalentes, no siempre es fácil extender estas ideas a las moléculas poliatómicas. Al aplicar la **teoría del enlace de valencia** a las moléculas poliatómicas, tenemos que explicar tanto la formación de los enlaces de pares de electrones como las geometrías observadas de las moléculas.

Para explicar geometrías, suponemos, en muchos casos, que los orbitales atómicos de un átomo se mezclan para formar nuevos orbitales llamados **orbitales híbridos**. La forma de estos orbitales híbridos es diferente de la de los orbitales atómicos originales. El proceso de mezclar y con ello alterar los orbitales atómicos cuando los átomos se acercan para formar enlaces se denomina **hibridación**.

Los orbitales se solapan para formar un enlace covalente





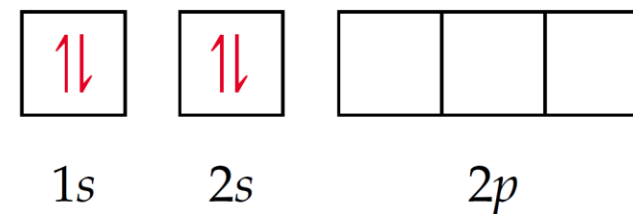
Orbitales híbridos sp

Tomemos como ejemplo la molécula de BeF_2 :

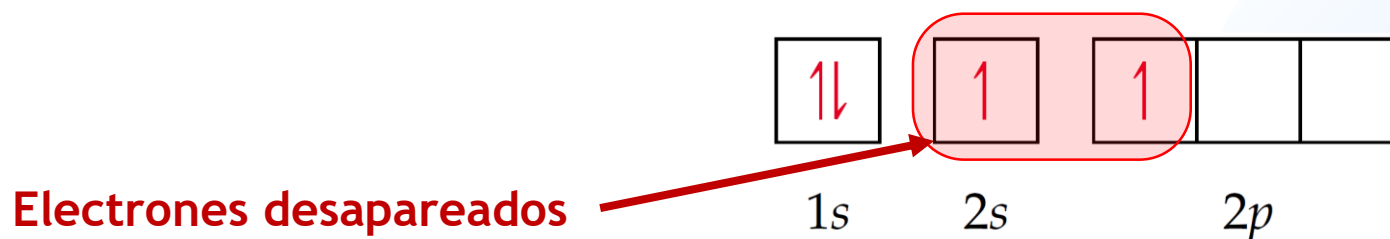


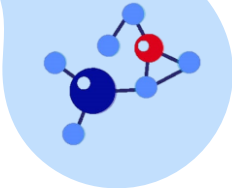
La configuración electrónica del F ($1s^2 2s^2 2p^5$) indica que hay un electrón no apareado en el orbital $2p$. Este electrón puede aparearse con el electrón no apareado del átomo Be para formar un enlace covalente polar. ¿Qué orbitales del átomo de Be se traslapan con los de los átomos de F para formar enlaces Be-F?

Configuración electrónica del Be en estado basal:



Como no tiene electrones no apareados, el Be no puede formar enlaces con los átomos de F. Sin embargo, el átomo de Be podría formar dos enlaces “promoviendo” uno de sus electrones $2s$ hacia un orbital $2p$:



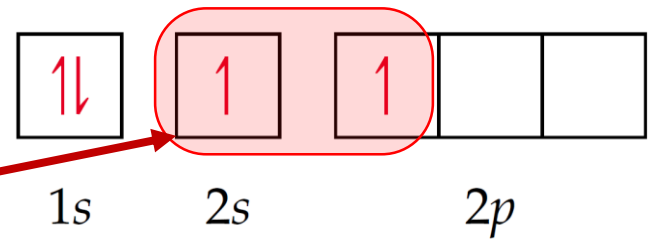


Orbitales híbridos sp

La única forma posible de formar enlaces idénticos es **hibridando** el orbital $2s$ con un orbital $2p$:

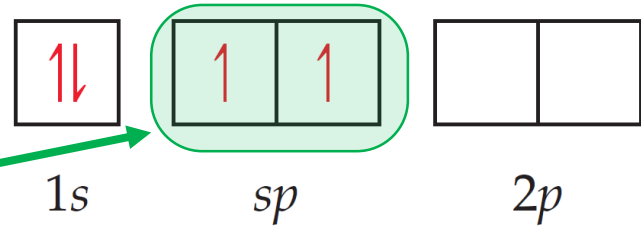
Electrones desapareados

Los enlaces no son idénticos



Electrones desapareados

Los enlaces son idénticos



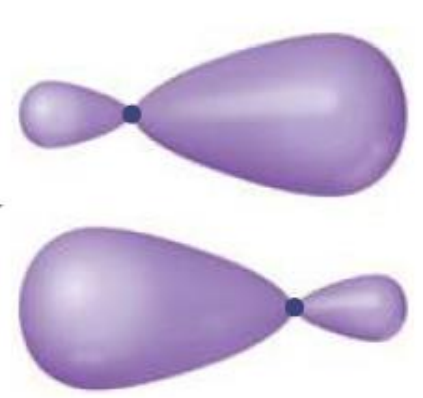
Un orbital atómico s

+



Un orbital atómico p

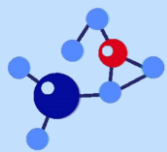
Hibridación



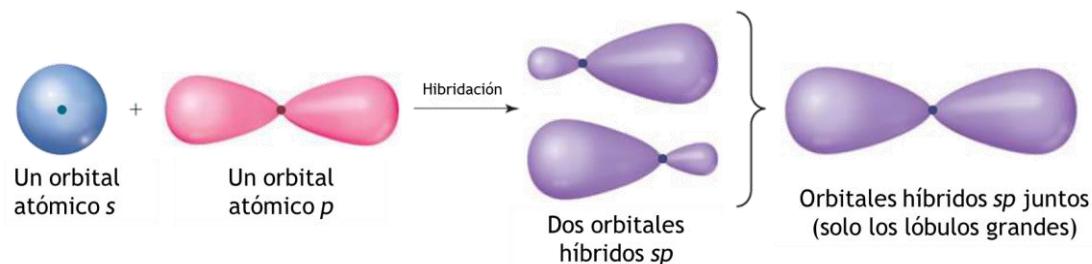
Dos orbitales híbridos sp



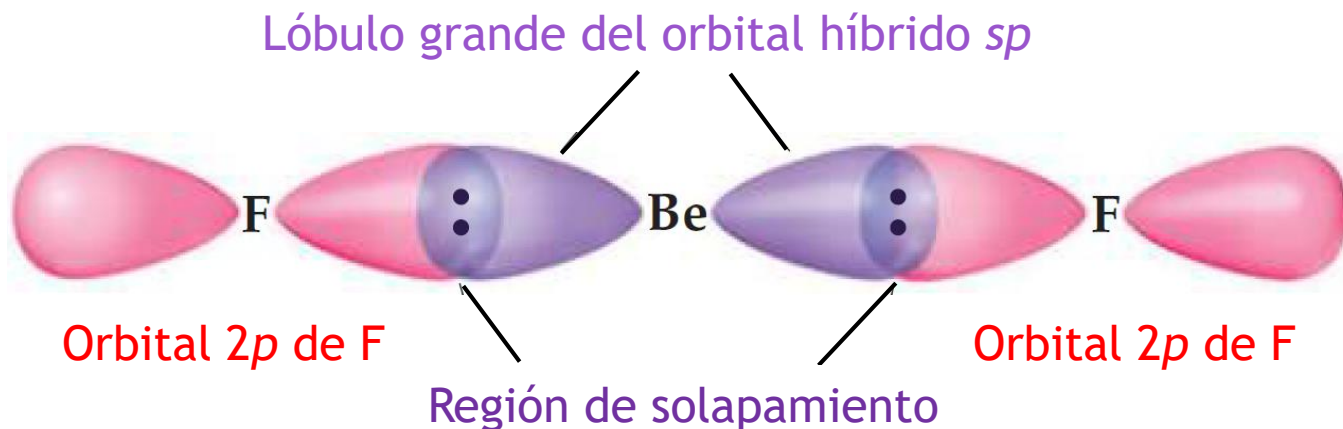
Orbitales híbridos sp juntos (solo los lóbulos grandes)



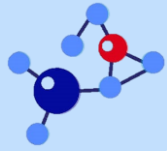
Orbitales híbridos sp



Debido a que se ha hibridado un orbital s con un orbital p , llamamos a cada uno orbital híbrido sp . De acuerdo con el modelo del enlace de valencia, un arreglo **lineal** de dominios de electrones implica una **hibridación sp** .



! Solo se dibujan los orbitales que participan en los enlaces, es decir los orbitales de la capa de valencia.

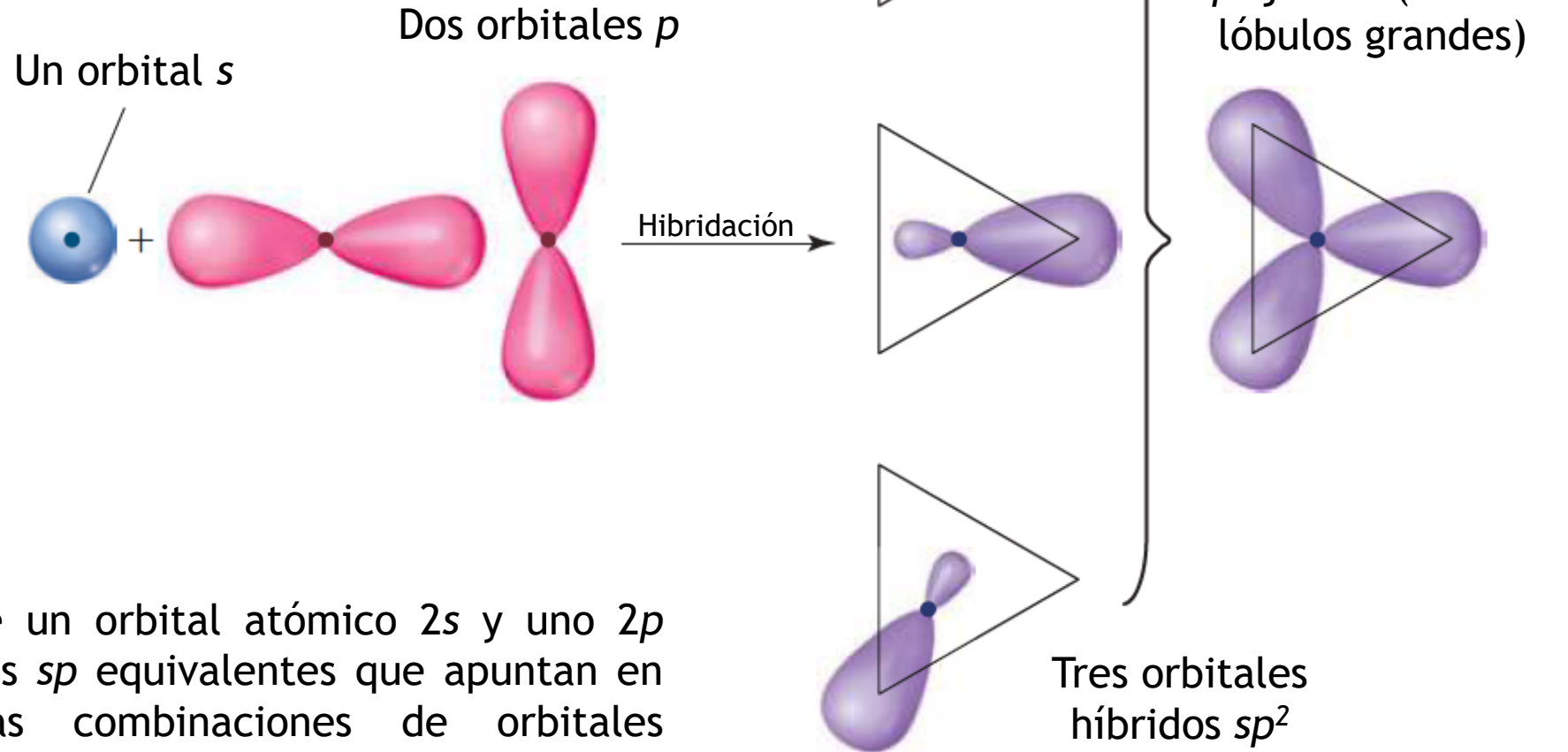


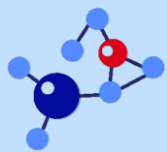
Orbitales híbridos sp^2

Siempre que combinamos cierto número de orbitales atómicos, obtenemos el mismo número de orbitales híbridos.

Cada orbital híbrido es equivalente a los otros, pero todos apuntan en direcciones distintas.

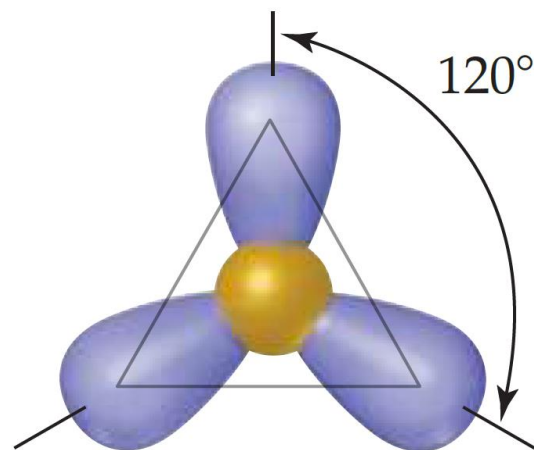
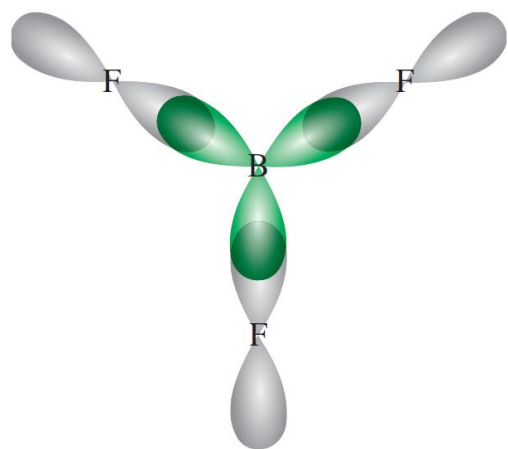
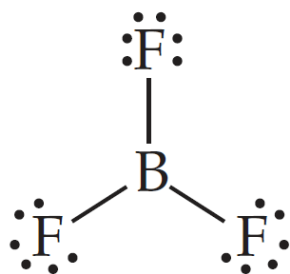
Entonces, la combinación de un orbital atómico $2s$ y uno $2p$ produce dos orbitales híbridos sp equivalentes que apuntan en direcciones opuestas. Otras combinaciones de orbitales atómicos pueden hibridarse para obtener diferentes geometrías.



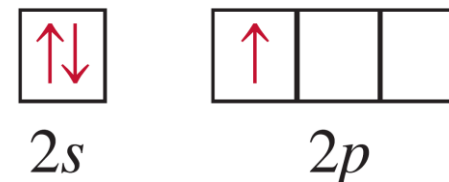


Orbitales híbridos sp^2

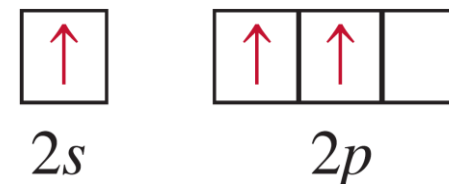
Analicemos la molécula de BF_3 . Por el modelo RPECV se sabe que la molécula es plana:



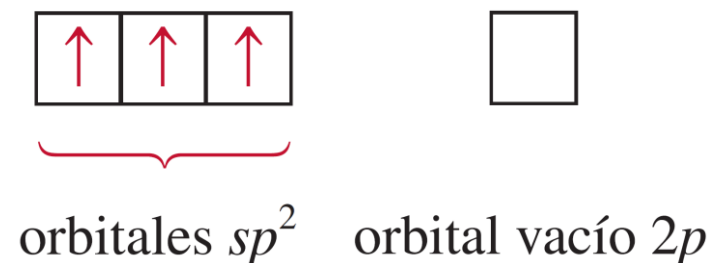
Al considerar solo los electrones de valencia del B, se tiene:

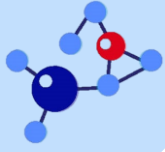


Al promover un electrón $2s$ a un orbital vacío $2p$, se tiene:



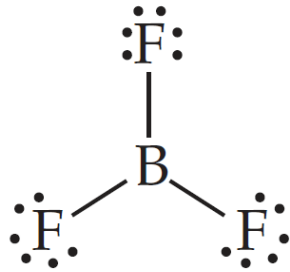
Mezclando el orbital $2s$ con los dos orbitales $2p$ se generan tres orbitales híbridos sp^2 :



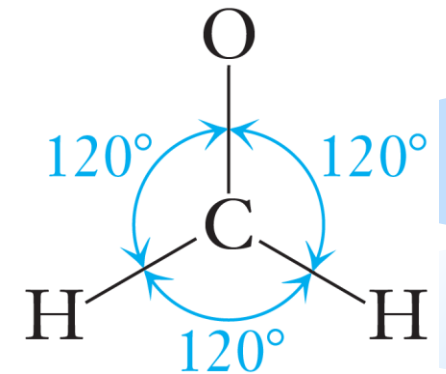
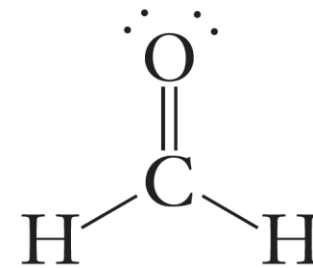
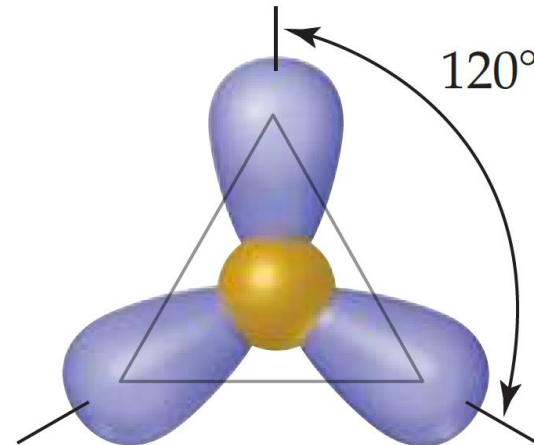
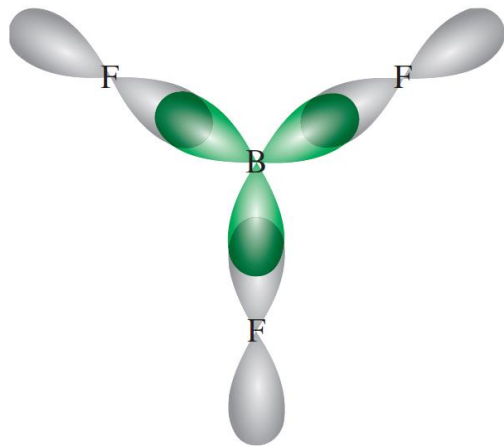


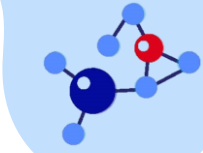
Orbitales híbridos sp^2

Estos tres orbitales sp^2 están en un plano, y el ángulo entre cualquier par de ellos es de 120° . Cada uno de los enlaces BF se forma a partir del solapamiento entre un orbital híbrido sp^2 del boro y un orbital $2p$ del flúor.



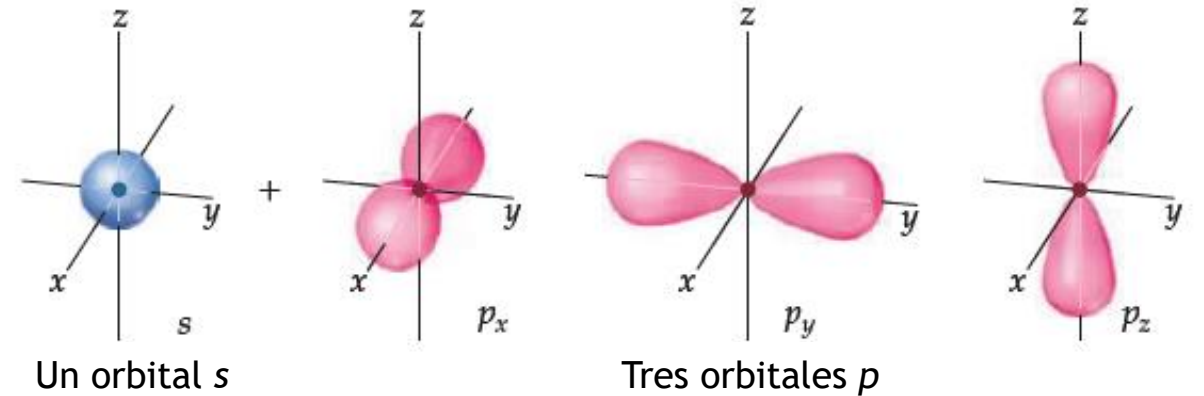
La hibridación sp^2 equivale a una geometría **trigonal plana**. Aplica también para moléculas que tienen un **enlace doble**.



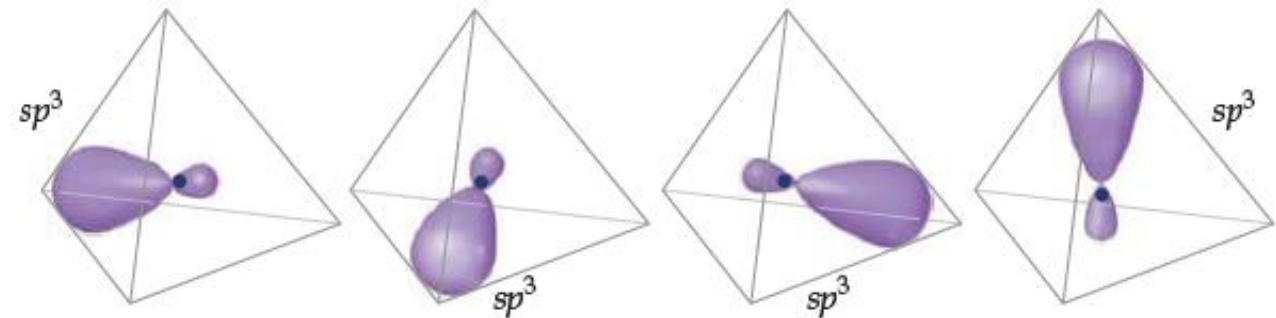


Orbitales híbridos sp^3

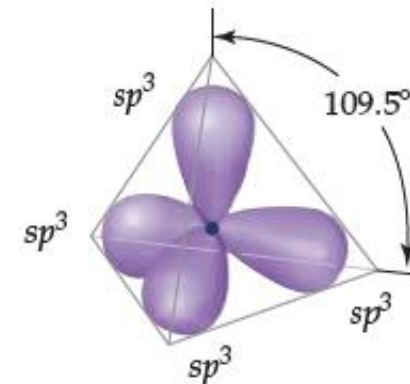
Independientemente del tipo de hibridación, un átomo que empieza con un orbital s y tres orbitales p poseerá **cuatro orbitales**, suficientes para **acomodar un total de ocho electrones** en un compuesto y obedecer a la **regla del octeto**.



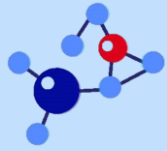
Hibridación



Orbitales híbridos sp^3 juntos (solo los lóbulos grandes)



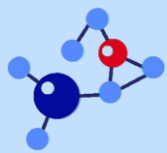
Cuatro orbitales híbridos sp^3



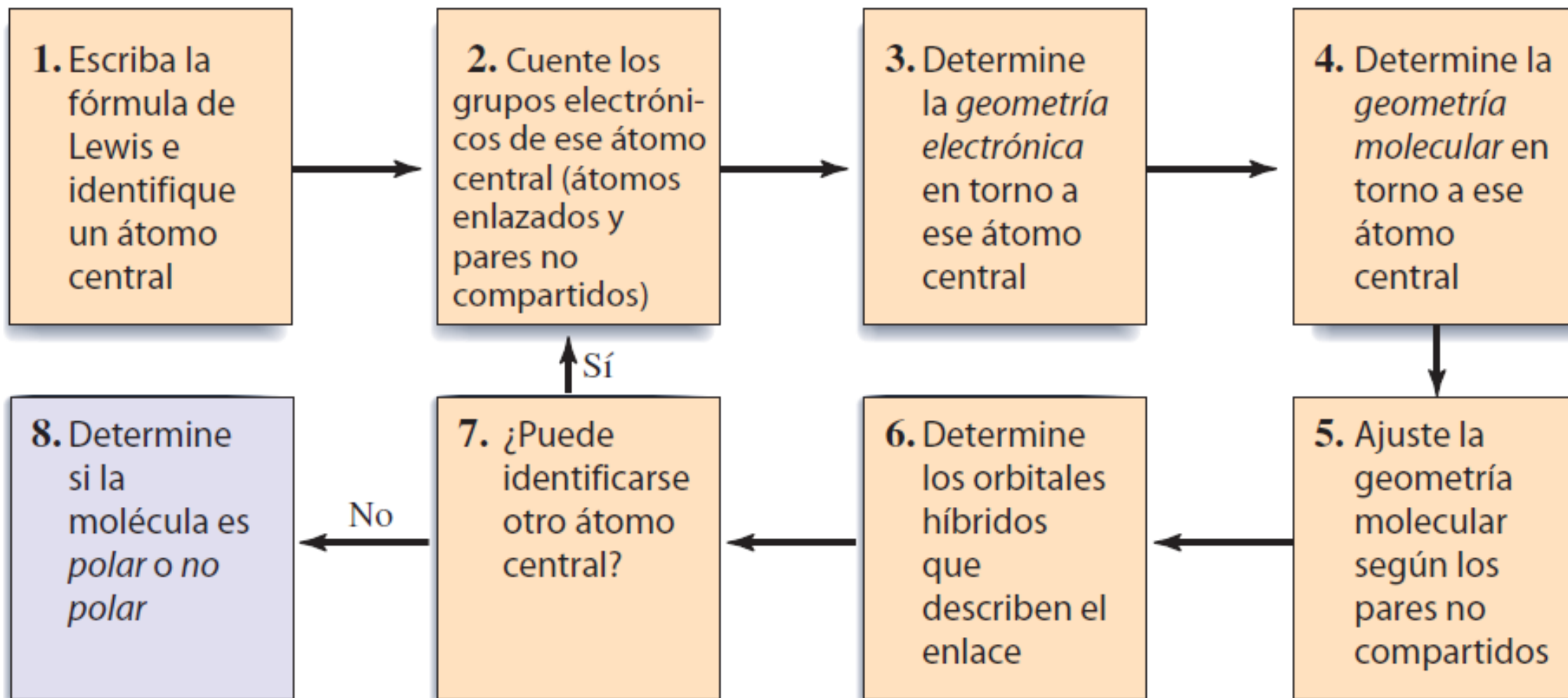
Hibridación

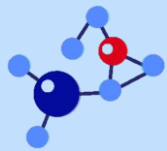
Para resumir el estudio sobre la hibridación, tenemos que:

- ✓ El concepto de **hibridación** no se aplica a átomos aislados. Es un **modelo teórico que se utiliza sólo para explicar el enlace covalente**.
- ✓ La hibridación es la **mezcla de por lo menos dos orbitales atómicos no equivalentes**, por ejemplo orbitales s y p . Como consecuencia, **un orbital híbrido no es un orbital atómico puro**. Los orbitales híbridos y los orbitales atómicos puros tienen formas muy diferentes.
- ✓ El número de orbitales híbridos generados es igual al número de orbitales atómicos puros que participan en el proceso de hibridación.
- ✓ La hibridación requiere energía; sin embargo, el sistema recupera de sobra esta energía durante la formación del enlace.
- ✓ Los enlaces covalentes en las moléculas y en los iones poliatómicos se forman a partir del **solapamiento de orbitales híbridos, o de orbitales híbridos con orbitales puros**. Como consecuencia, el esquema de hibridación en el enlace está aún dentro del contexto de la teoría de enlace valencia; **suponemos que los electrones de una molécula ocupan orbitales híbridos de los átomos individuales**.



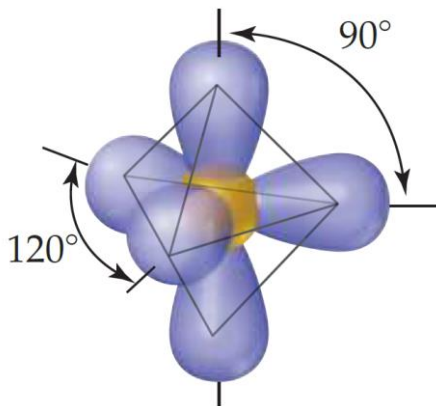
Modelos moleculares



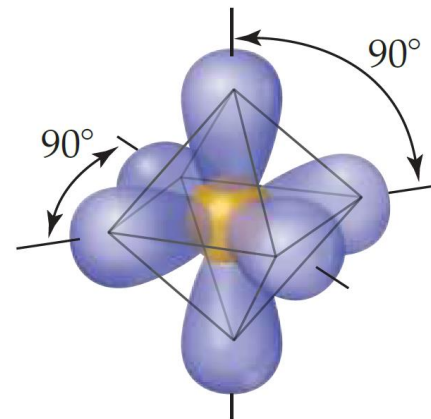


Hibridación de orbitales s , p y d

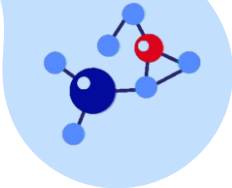
Para los elementos del tercer periodo en adelante no siempre es posible explicar la geometría molecular suponiendo sólo la hibridación de los orbitales s y p . Para comprender la formación de moléculas con **geometría bipiramidal trigonal** y **octaédrica**, por ejemplo, debemos incluir los orbitales d en el concepto de hibridación.



Bipiramidal trigonal



Octaédrica

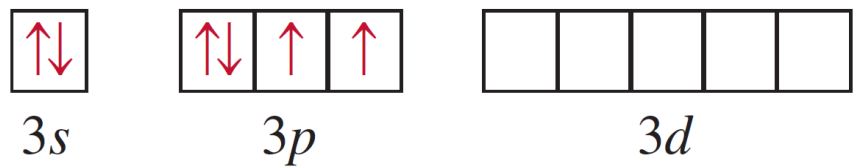


Hibridación de orbitales s , p y d

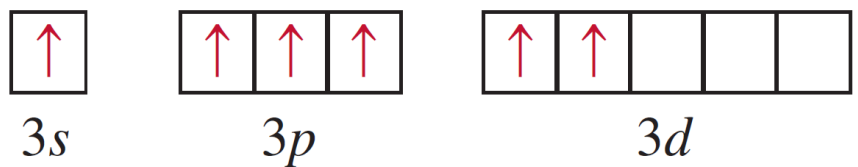
Ejemplo: SF_6

Átomo central: S

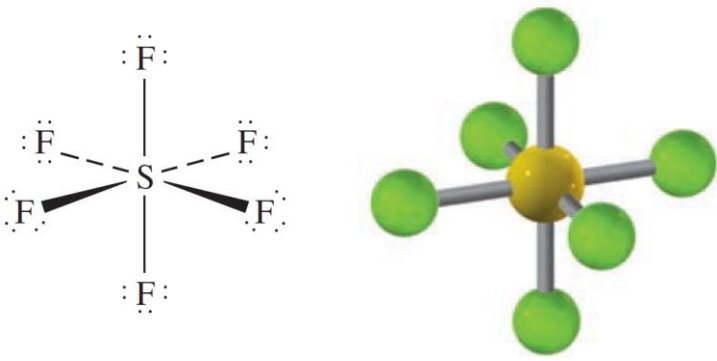
Configuración electrónica en estado basal:



Al promover electrones de $3s$ y $3p$ a los orbitales $3d$, se tiene:

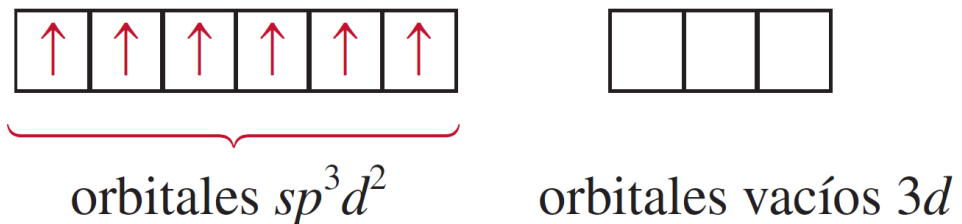


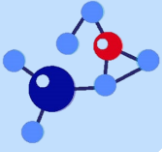
Se necesitan enlazar 6 átomos de F.



Geometría octaédrica

Al mezclar el orbital $3s$, tres orbitales p y dos orbitales $3d$, se generan seis orbitales híbridos sp^3d^2 :

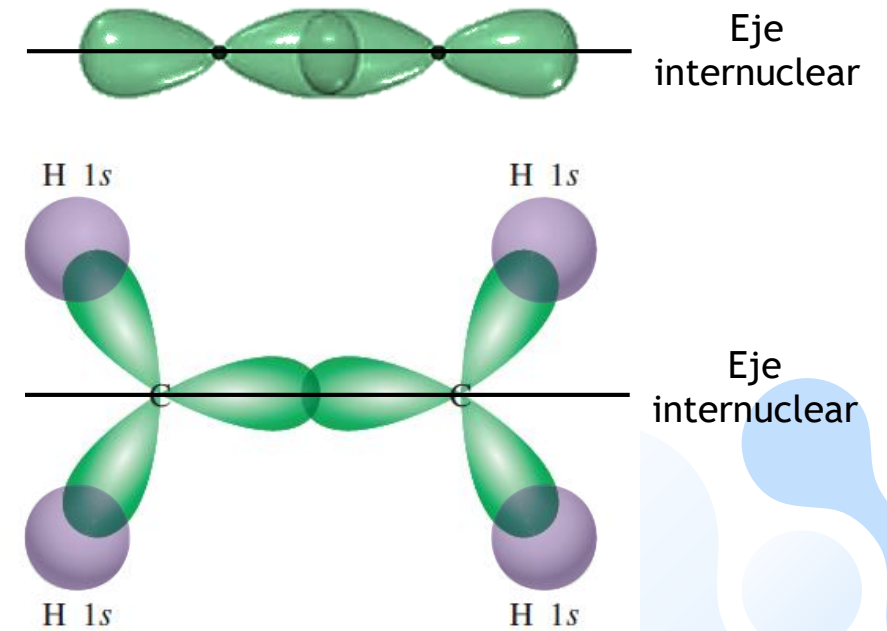
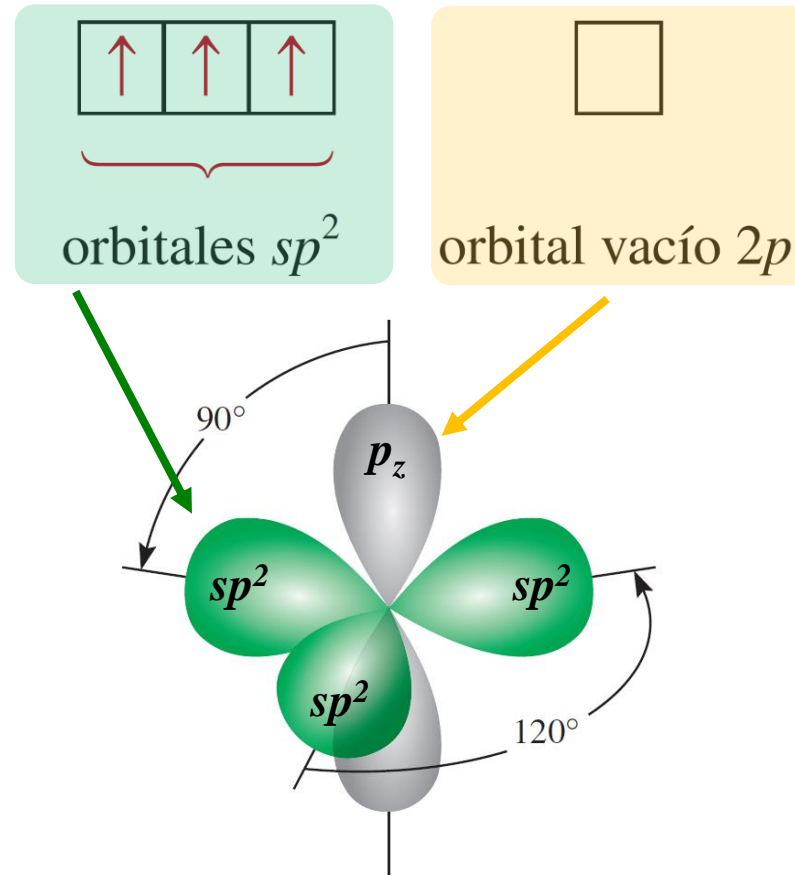
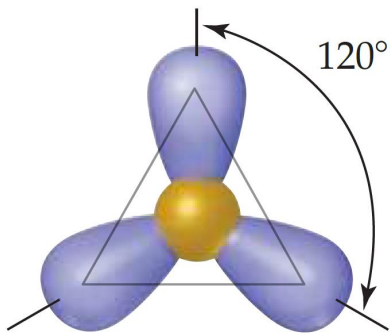
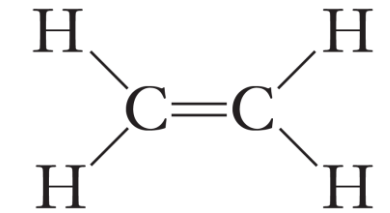


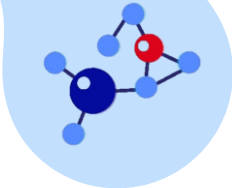


Hibridación en enlaces múltiples

Ejemplo: molécula de etileno (C_2H_4)

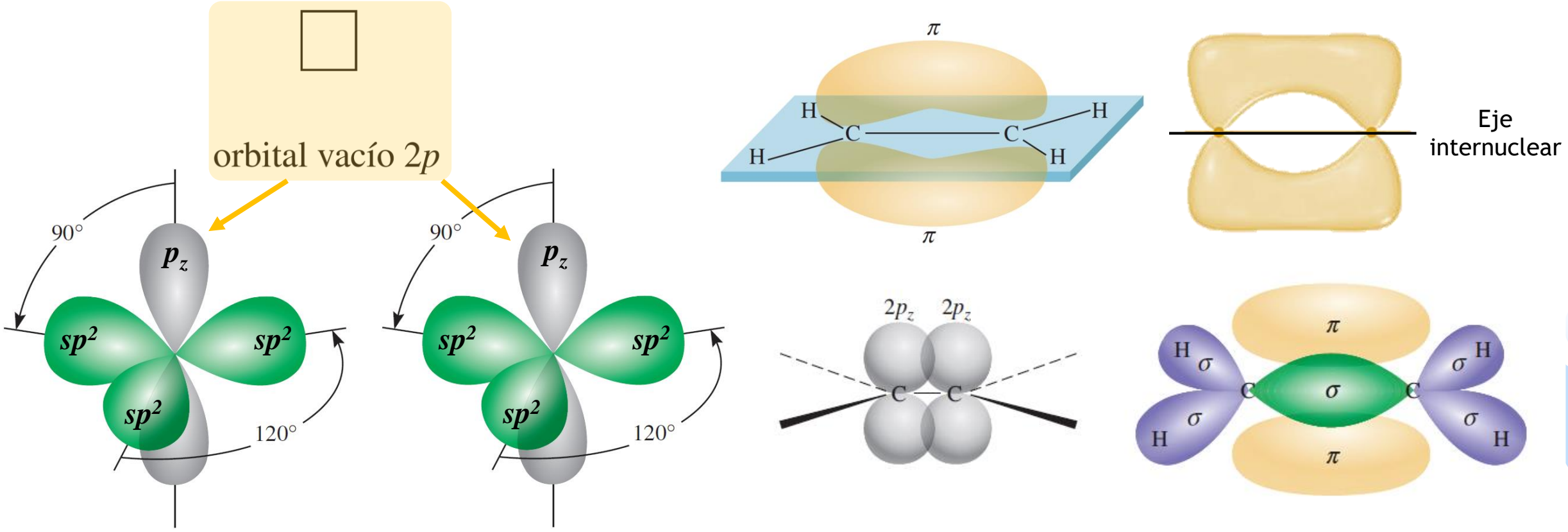
Las moléculas con un enlace doble tienen una geometría trigonal plana (sp^2).

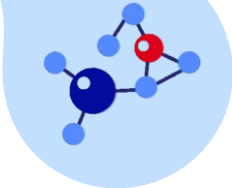




Hibridación en enlaces múltiples

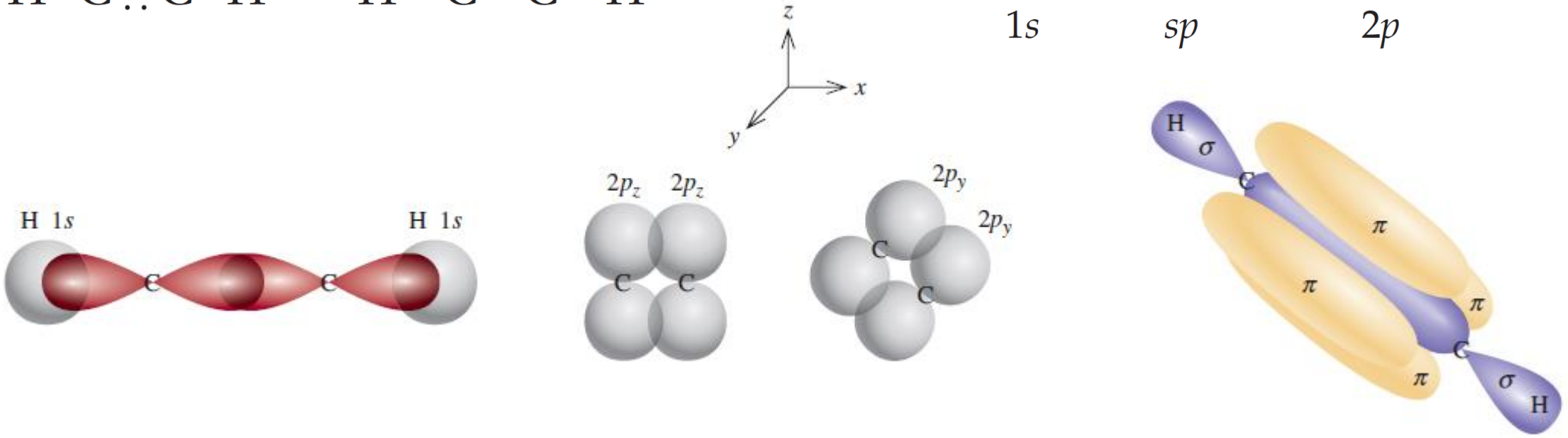
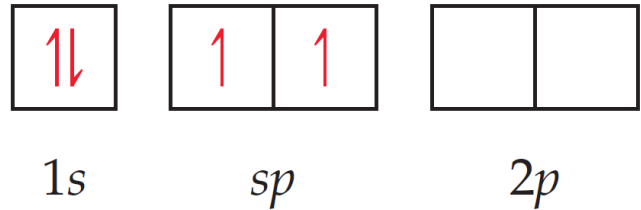
Los orbitales p_z vacíos de cada átomo de C se combinan y forman una nube de electrones por encima y por debajo del enlace C-C. Los **enlaces simples** se denominan “**sigma**” (σ). La **nube de electrones** alrededor de un enlace σ se denomina **enlace pi** (π)



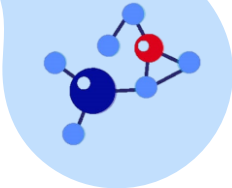


Hibridación en enlaces múltiples

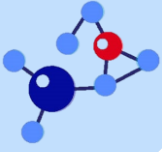
Las moléculas con enlaces triples exhiben una geometría molecular lineal.
Un **enlace triple** está conformado por **un enlace sigma** (σ) y **dos enlaces pi** (π) y presenta una hibridación sp .



Orbitales híbridos



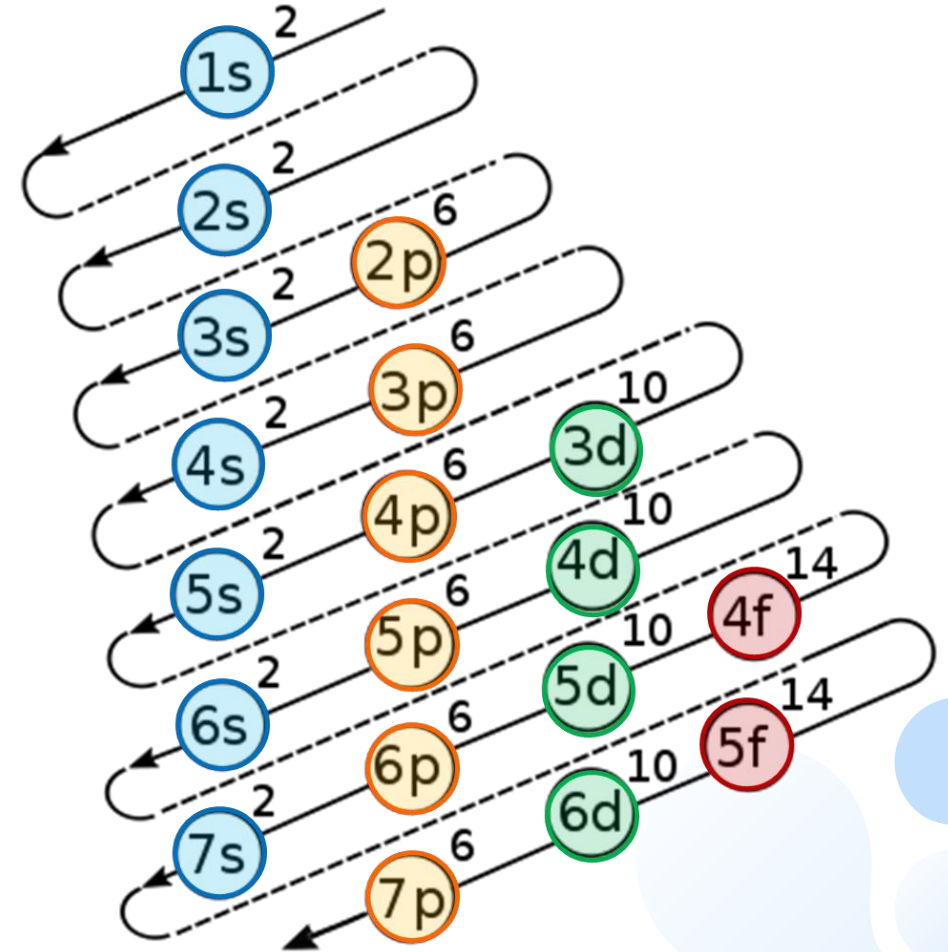

Orbitales atómicos puros del átomo central	Hibridación del átomo central	Número de orbitales híbridos	Forma de los orbitales híbridos	Ejemplos
s, p	sp	2	<p>180°</p> <p>Lineal</p>	BeCl_2
s, p, p	sp^2	3	<p>120°</p> <p>Plana trigonal</p>	BF_3
s, p, p, p	sp^3	4	<p>109.5°</p> <p>Tetraédrica</p>	$\text{CH}_4, \text{NH}_4^+$
s, p, p, p, d	sp^3d	5	<p>90°</p> <p>120°</p> <p>Bipiramidal trigonal</p>	PCl_5
s, p, p, p, p, d	sp^3d^2	6	<p>90°</p> <p>90°</p> <p>Octaédrica</p>	SF_6

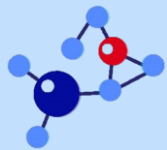


Energía de los Orbitales

E

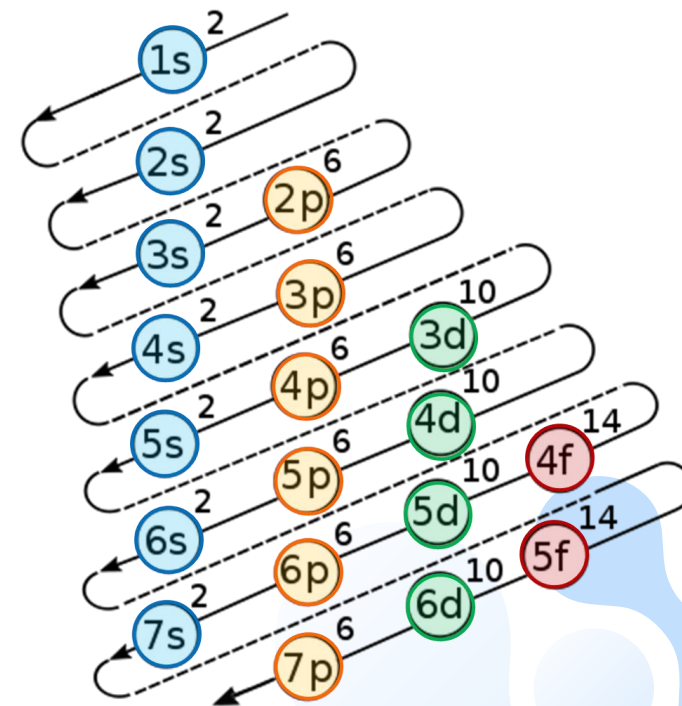
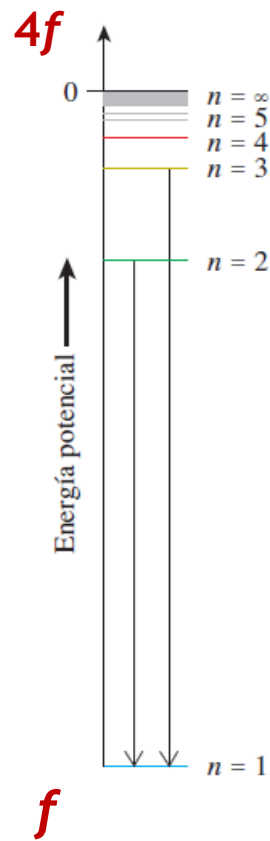
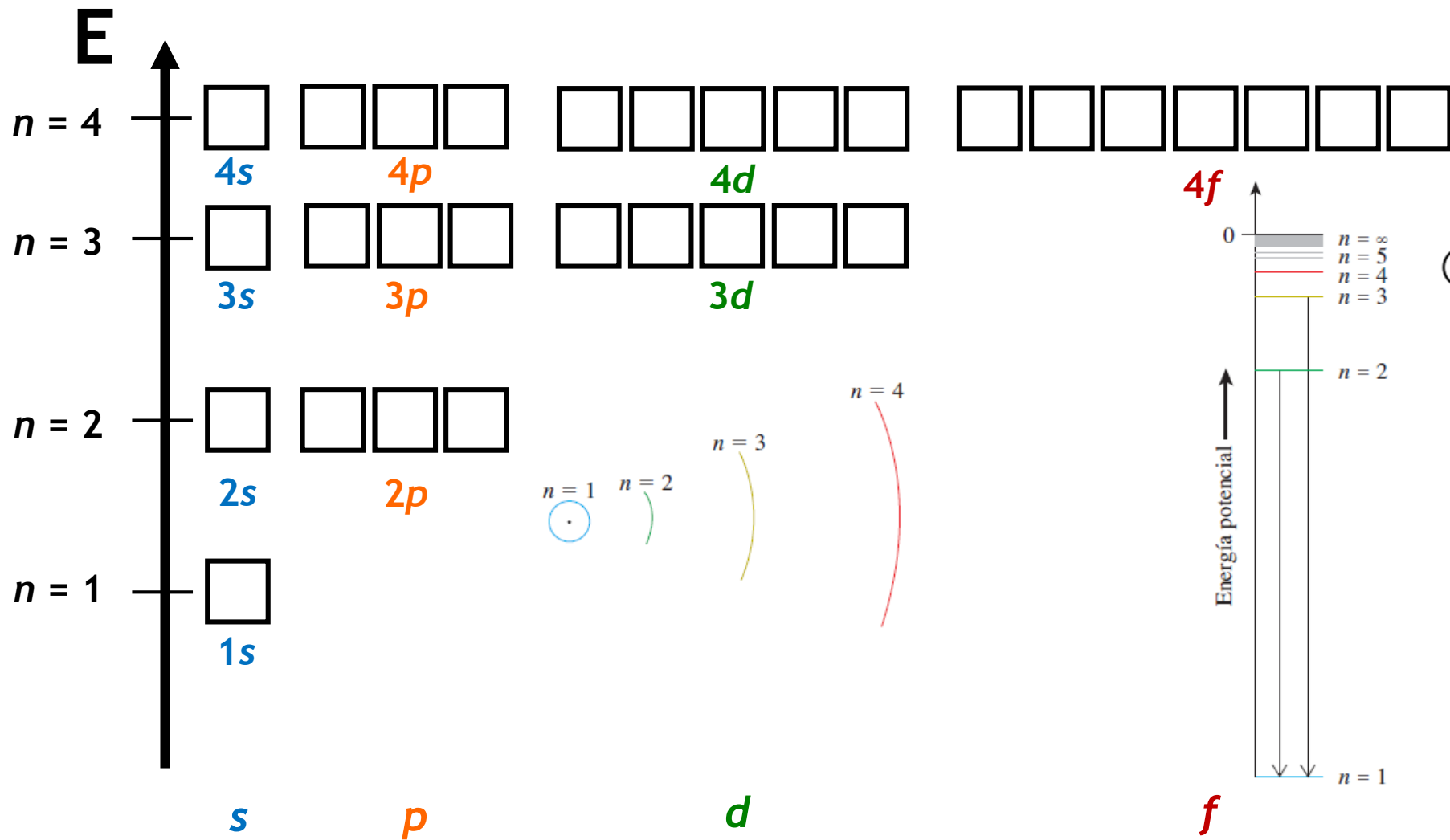
¿Cómo ubicar el diagrama de configuración electrónica en una gráfica de energía?

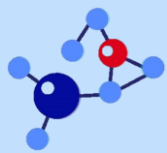




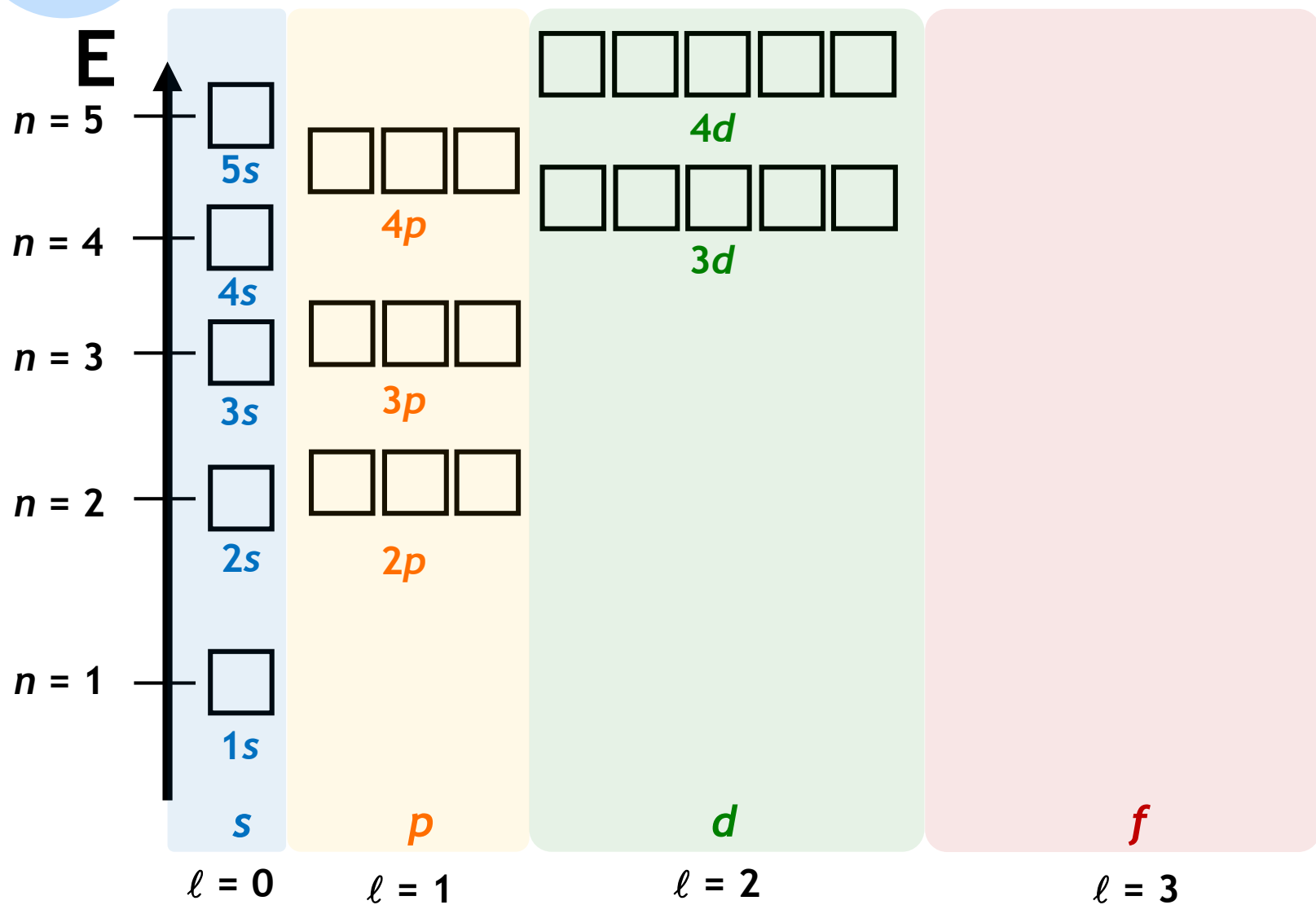
Energía de los Orbitales

! Todos los orbitales con el mismo número cuántico principal (n) tienen la misma energía.

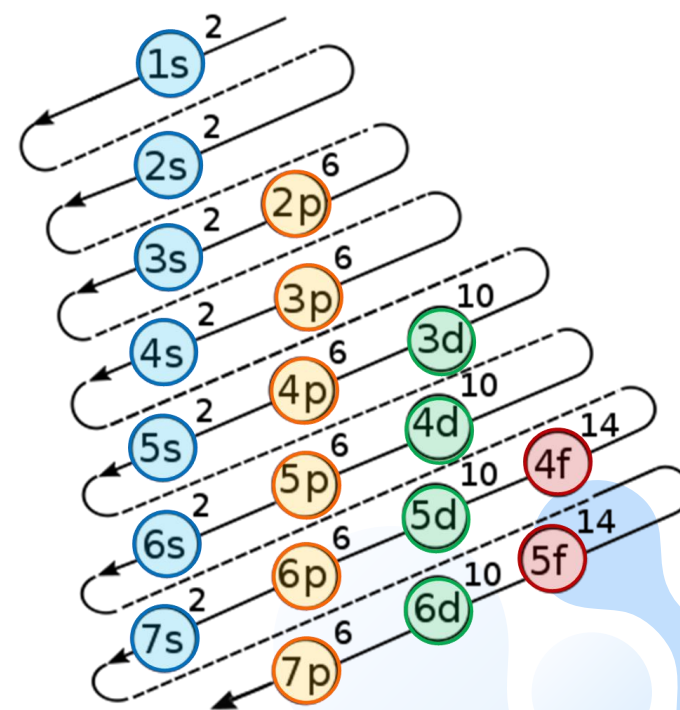


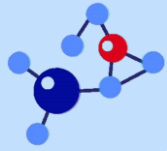


Energía de los Orbitales



! En realidad, el nivel de energía depende tanto de n como de l .





Teoría de Orbitales Moleculares

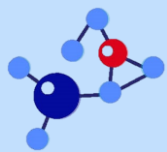
La teoría de enlace de valencia (EV):

- ✓ Explica, al menos cualitativamente, la estabilidad del enlace covalente en términos del solapamiento de orbitales atómicos.
- ✓ La hibridación puede explicar la geometría molecular predicha por el modelo RPECV.

Sin embargo, la suposición de que los electrones en una molécula ocupan orbitales atómicos de los átomos individuales, es sólo una aproximación, ya que **cada electrón enlazante en una molécula debe estar en un orbital característico de la molécula como un todo.**

En algunos casos la teoría de enlace valencia no explica satisfactoriamente algunas de las propiedades observadas de las moléculas.

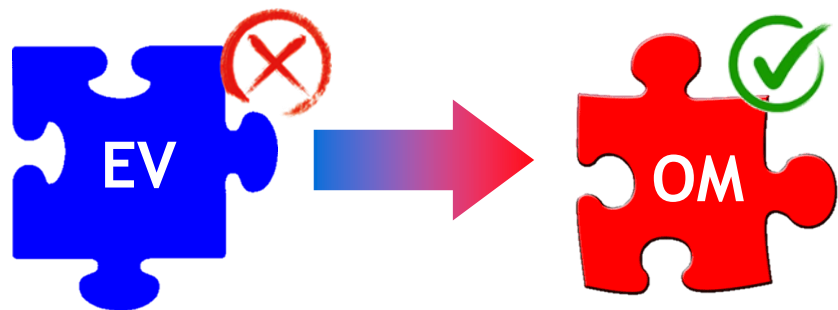




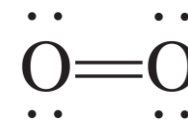
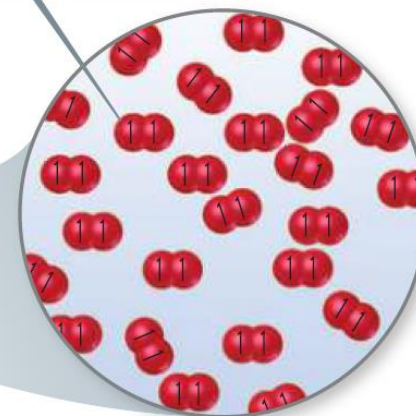
Teoría de Orbitales Moleculares

La forma como se comporta una sustancia en un campo magnético brinda información importante sobre el arreglo de sus electrones. Las moléculas con uno o más electrones no apareados son atraídas hacia un campo magnético. Cuantos más electrones no apareados tenga una especie, mayor será la fuerza de atracción (**paramagnetismo**). Las sustancias solo con electrones apareados son débilmente repelidas por un campo magnético (**diamagnetismo**).

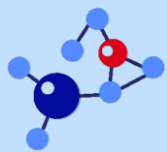
De acuerdo la teoría EV, todos los electrones en el O_2 están apareados y la molécula debería ser **diamagnética**. Los experimentos han demostrado que la molécula de O_2 es **paramagnética**, con dos electrones desapareados.



Debido a que las moléculas de O_2 son paramagnéticas



...éstas son atraídas por un campo magnético



Teoría de Orbitales Moleculares

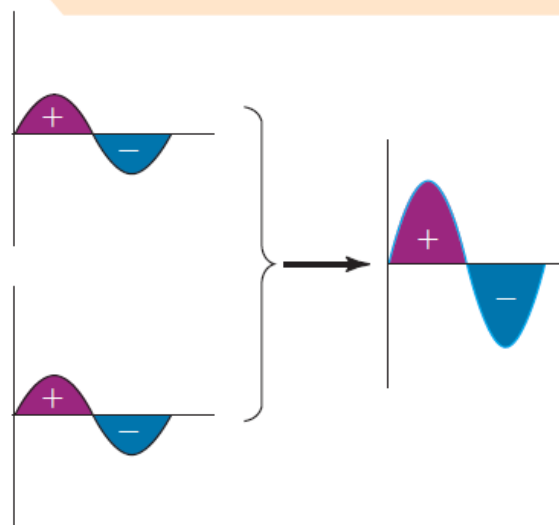
Un orbital sólo tiene significado físico cuando elevamos al cuadrado su función de onda para describir la densidad electrónica; por lo tanto, **no es importante el signo total de la función de onda que describe un orbital atómico**. No obstante, cuando combinamos dos orbitales, el signo de las funciones de onda sí resulta muy importante.

Estos signos indican el signo total de la función de onda

$$-\frac{\hbar^2}{8\pi^2m}\left(\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}\right) + V\psi = E\psi$$

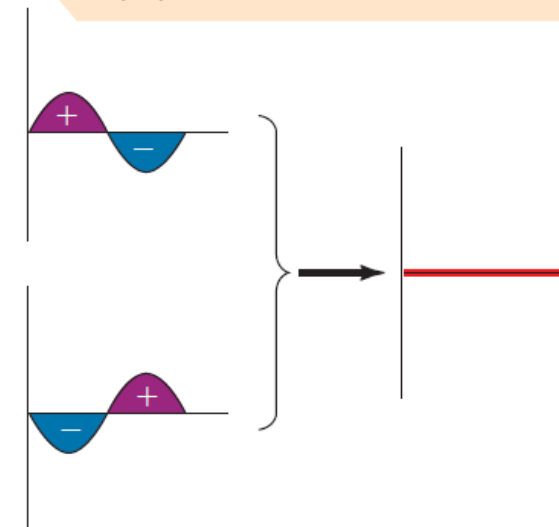
Ecuación de Onda de Schödinger

Superposición en fase (suma)

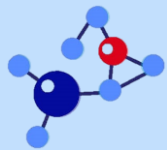


A Si se suman las dos ondas idénticas que se muestran a la izquierda, interfieren en forma constructiva y generan la onda más intensa de la derecha.

Superposición fuera de fase (sustracción)



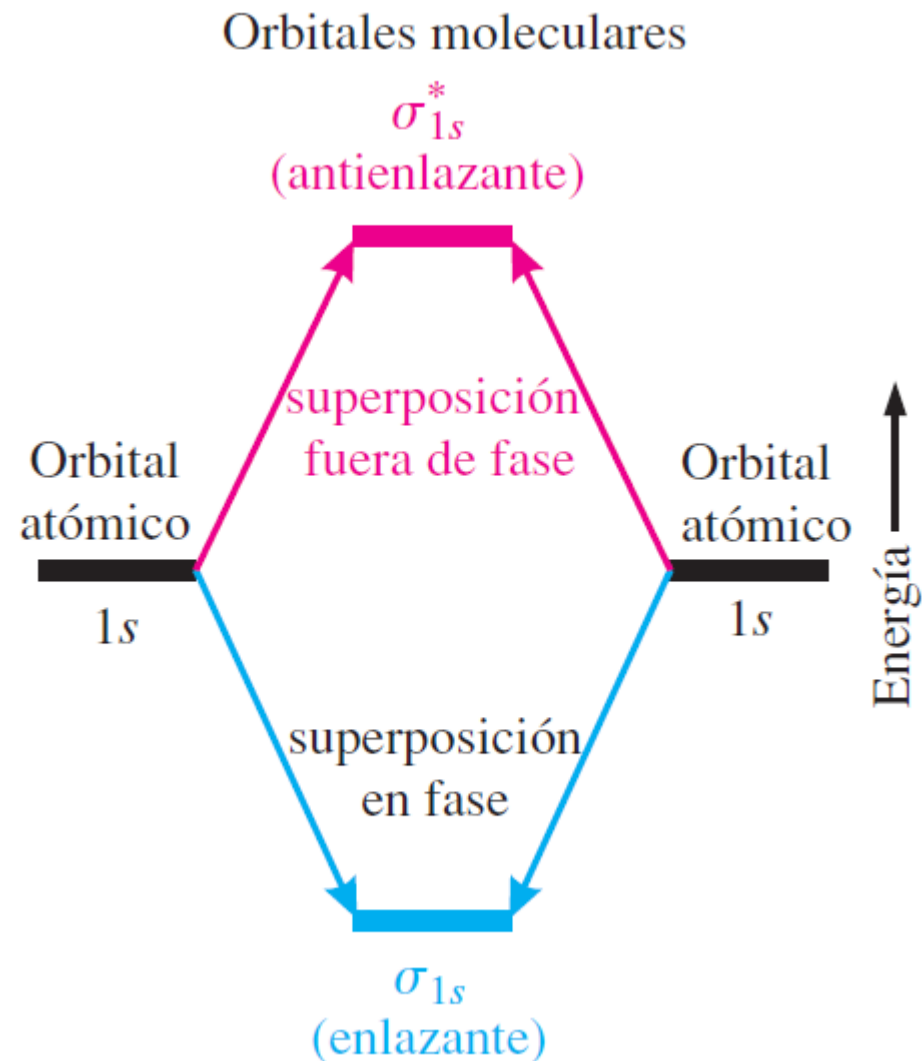
B Por el contrario, si éstas se sustraen, es como si las fases (signos) de una onda se invirtieran y se sumaran a la primera onda, lo que causa la interferencia destructiva y hace que la onda de la derecha tenga amplitud cero; esto es, da como resultado una línea recta.

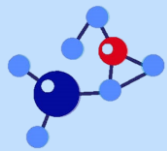


Teoría de Orbitales Moleculares

Cuando se superponen dos orbitales con mismo signo (en fase), tiene lugar una interacción constructiva y se produce un **orbital molecular enlazante**. La energía del orbital enlazante siempre es menor (**más estable**) que la energía de los orbitales que se combinan.

Cuando los orbitales se superponen con diferente signo (fuera de fase), la interacción destructiva reduce la probabilidad de encontrar electrones en la región entre los núcleos y se genera un **orbital molecular antienlazante**. Éste tiene mayor energía (**menos estable**) que los orbitales atómicos originales y conduce a una repulsión entre los dos átomos.



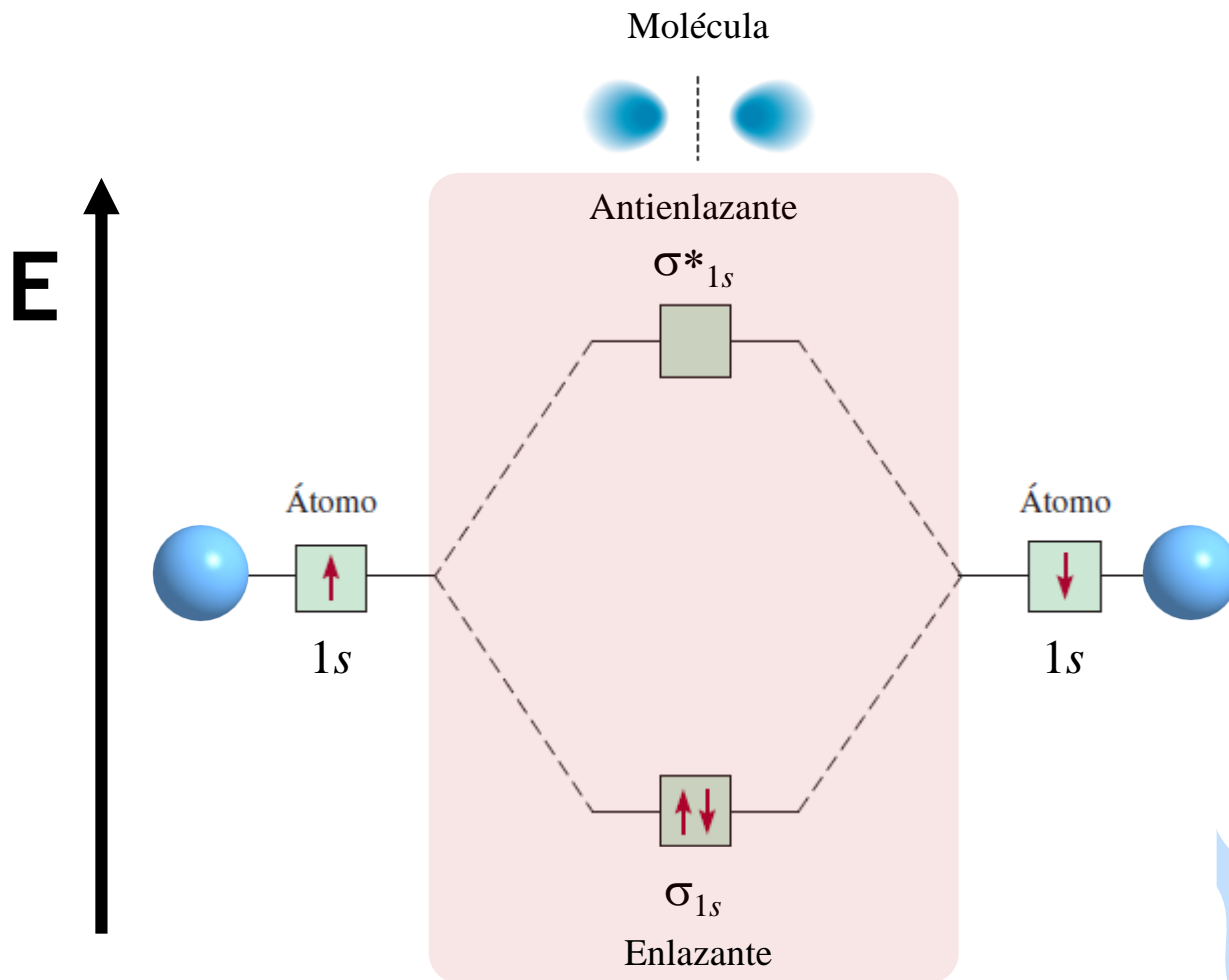


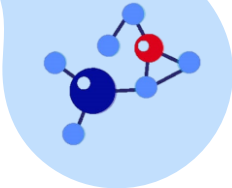
Teoría de Orbitales Moleculares

Para que dos átomos puedan formar una molécula, la TOM postula que:

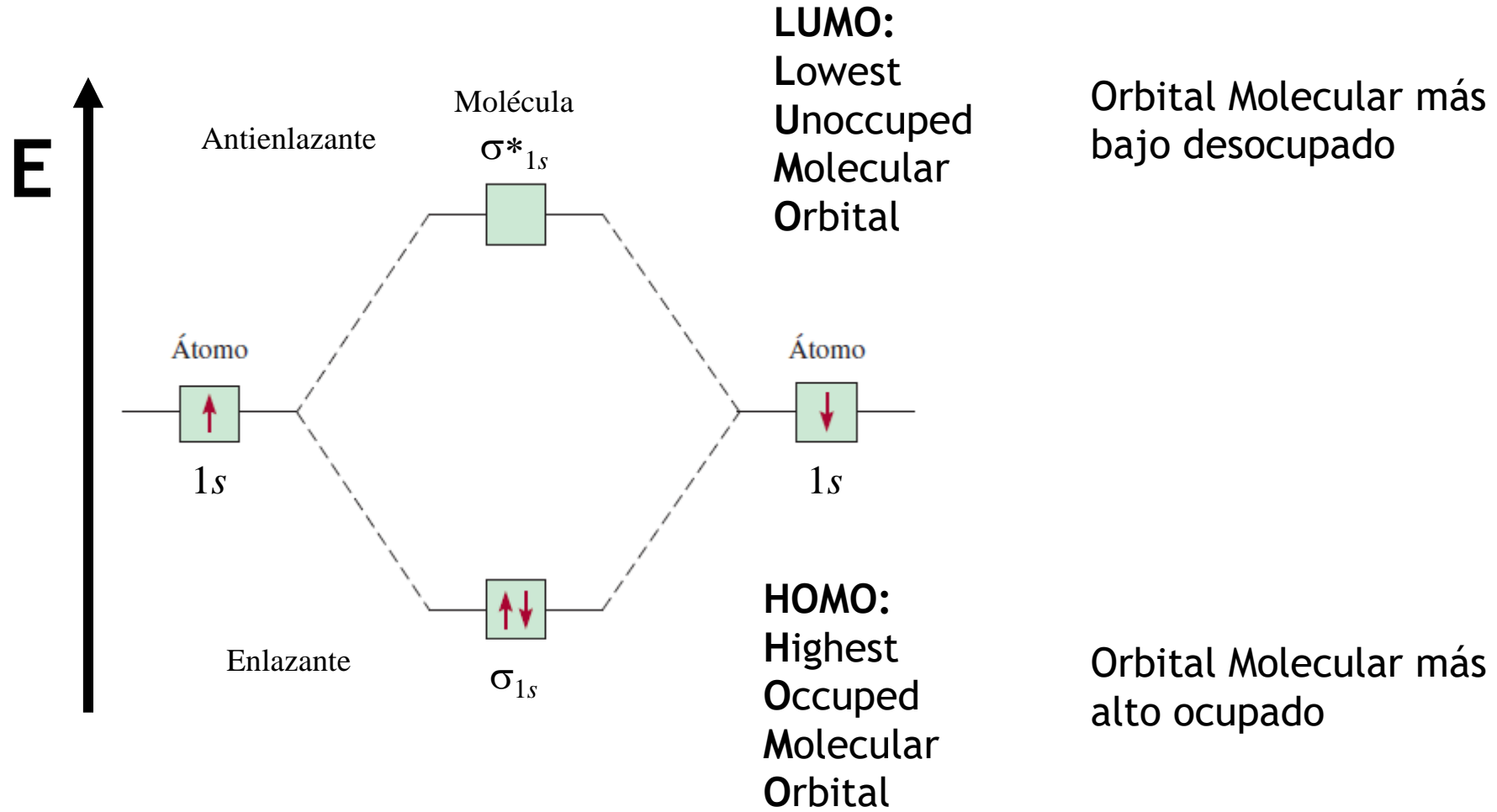
- ✓ Los orbitales atómicos deben tener energías similares
- ✓ Se formarán tantos orbitales moleculares como orbitales atómicos se combinen
- ✓ Los orbitales deben tener la misma simetría (forma)

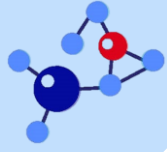
Consideremos dos átomos de H, cada uno aporta un electrón para formar una molécula de H₂.





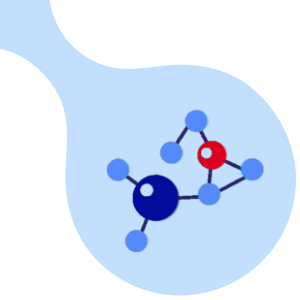
Teoría de Orbitales Moleculares





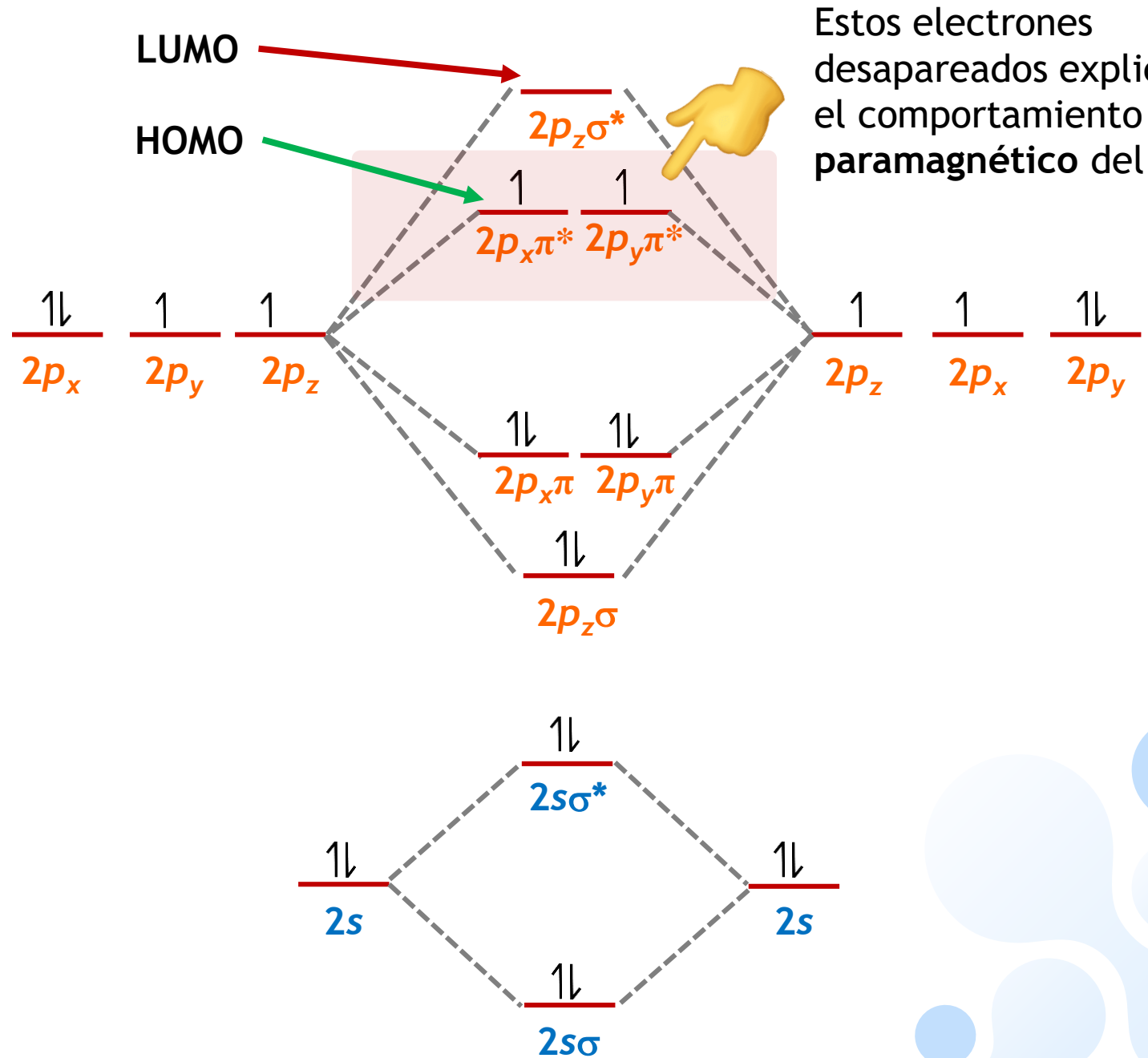
Teoría de Orbitales Moleculares

1. Escribir la configuración electrónica
2. Identificar la capa de valencia
3. Establecer una escala energética
4. Ubicar los orbitales atómicos de menor a mayor energía
5. Completar con electrones cada orbital de cada átomo
6. Llenar los orbitales moleculares con electrones **siempre** desde los orbitales de menor energía a los de mayor energía
7. Identificar los orbitales HOMO y LUMO
8. Revisar los orbitales apareados y desapareados en HOMO

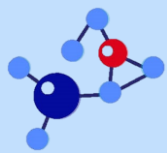


Oxígeno: $1s^2 2s^2 2p^4$
Capa de valencia

E ↑



Estos electrones desapareados explican el comportamiento paramagnético del O_2 .



Teoría de Orbitales Moleculares

	Li ₂	B ₂	C ₂	N ₂	O ₂	F ₂	
$\sigma_{2p_x}^*$	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	$\sigma_{2p_x}^*$
$\pi_{2p_y}^*, \pi_{2p_z}^*$	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	$\pi_{2p_y}^*, \pi_{2p_z}^*$
σ_{2p_x}	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	π_{2p_y}, π_{2p_z}
π_{2p_y}, π_{2p_z}	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	σ_{2p_x}
σ_{2s}^*	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	σ_{2s}^*
σ_{2s}	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	σ_{2s}
Orden de enlace	1	1	2	3	2	1	
Longitud de enlace (pm)	267	159	131	110	121	142	
Entalpía de enlace (kJ/mol)	104.6	288.7	627.6	941.4	498.7	156.9	
Propiedades magnéticas	Diamagnética	Paramagnética	Diamagnética	Diamagnética	Paramagnética	Diamagnética	